

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление Физики

Отделение Экспериментальной физики

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
<b>Моделирование металлических наночастиц методом молекулярной динамики</b>

УДК 538.9-022.532:539.19

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Пин Ань		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Ларионова Е.В.	к.х.н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

Томск – 2018г.

### Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
<b>Р1</b>	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
<b>Р2</b>	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
<b>Р3</b>	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
<b>Р4</b>	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
<b>Р5</b>	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		

<b>P6</b>	<u>Научно-исследовательская деятельность</u>  Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)
<b>P7</b>	<u>Научно-инновационная деятельность</u>  Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
<b>P8</b>	<u>Организационно-управленческая</u>  Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
<b>P9</b>	<u>Педагогически-просветительская</u>  Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
Направление Физики  
Отделение Экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ОЭФ  
\_\_\_\_\_ Лидер А.М.  
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы
---------------------

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б41	Пин Ань

Тема работы:

Моделирование металлических наночастиц методом молекулярной динамики	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.02.2018 г., 618/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Программный пакет LAMMPS, для моделирования методом молекулярной динамики. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия для титана, меди и алюминия.</p>
---	---

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>– Обзор литературных источников;</p> <p>– Построение модели наночастиц в программе LAMMPS;</p> <p>– Исследование влияние размера и формы на температуру плавления металлических наночастиц;</p> <p>– Анализ полученных результатов;</p> <p>– Социальная ответственность;</p> <p>– Финансовый менеджмент, ресурс, эффективность и ресурсосбережение;</p> <p>– Заключение.</p>
<p><b>Перечень графического материала</b></p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы** *(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Ларионова Екатерина Владимировна, доцент, Кандидат химических наук, Отделение контроля и диагностики
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Черепанова Наталья Владимировна, Доцент, Отделение социально-гуманитарных наук, Школа инженерного предпринимательства.

**Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:**

Социальная ответственность

Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Пин Ань		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА**  
**«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И**  
**РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б41	Пин Ань

<b>Школа</b>	Инженерная школа ядерных технологий	<b>Отделение</b>	Экспериментальная физика
<b>Уровень образования</b>	Бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	03.03.02 Физика

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих
--	--

2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов
--	--

3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Знакомство с системой налогообложения, со ставками налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования
---	--

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ
--	--

2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет.
---	--

3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей
---	---

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
150Б41	Пин Ань		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА**  
**«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б41	Пин Ань

<b>Школа</b>	Инженерная школа ядерных технологий	<b>Отделение</b>	Экспериментальная физика
<b>Уровень образования</b>	Бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	03.03.02 Физика

**Тема дипломной работы:** моделирование металлических наночастиц методом молекулярной динамики.

**Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:**

<i>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</i>	<i>Моделирование плавления наночастиц метода молекулярной динамики в программе LAMMPS</i>
---	---

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

<p><b>1. Производственная безопасность</b></p> <p><i>1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</li> <li>– действие фактора на организм человека;</li> <li>– приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);</li> <li>– предлагаемые средства защиты;</li> <li>– (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства).</li> </ul> <p><i>1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– механические опасности (источники, средства защиты);</li> <li>– термические опасности (источники, средства защиты);</li> </ul> <p><i>электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты)</i></p>	<p>Анализ вредных факторов и опасные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Микроклимат</li> <li>• Производственный шум</li> <li>• Электромагнитные поля</li> <li>• Освещенность</li> <li>• Электробезопасность</li> <li>• Факторы пожарной и взрывной природы</li> </ul>
--	--



<b>2. Экологическая безопасность:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– защита селитебной зоны</li> <li>– анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</li> </ul> <p>разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</p>	Приведение меры охраны окружающей среды от отходов бумаги
<b>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения;</li> <li>• выбор наиболее типичной ЧС;</li> <li>• разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</li> </ul> <p>разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.</p>
<b>4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> </ul> <p>организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</p>	Приведение перечни ГОСТов, СНиПов и др.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Ларионова Е.В.	к.х.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Пин Ань		

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения \_\_\_\_\_

Форма представления работы:

бакалаврская работа
---------------------

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН  
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2017	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2017	Построение металлических наночастиц разных форм и размера в программе LAMMPS	15
30.12.2017	Определение температуры плавления металлических и исследование влияние размера на температуру плавления наночастиц	20
30.04.2018	Анализ результатов	15
25.05.2018	Социальная ответственность	15
25.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2018	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

**СОГЛАСОВАНО:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 98 с., 28 рис., 28 табл., 19 источников, 0 прил.

Ключевые слова: моделирование, метод молекулярной динамики, наночастицы, температура плавления, титан, спекание.

Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель наночастицы титана.

Цель работы – Моделирование плавления наночастиц титана различного радиуса методом молекулярной динамики.

Используемые установки: программа LAMMPS, OVITO, FAR-MANAGER, Wolfram Mathematica.

В процессе исследования проводились: работа по определению потенциальной энергии и радиальной функции распределения для определения температуры плавления.

В результате исследования определены температуры плавления частиц разного радиуса и зависимость температуры плавления от радиуса частиц.

Область применения: область технологии 3Д печати.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается во внесении вклада в разработку теории технологии плавления наночастиц.

В будущем планируется исследовать процесс плавления частиц больших размеров и процесс спекания большого числа частиц.

## Содержание

<b>Введение .....</b>	<b>15</b>
<b>Глава 1 Литературный обзор.....</b>	<b>17</b>
1.1 Наночастицы.....	17
1.1.1 Наночастицы и кластеры.....	17
1.1.2 Свойства наночастиц .....	18
1.2 Плавление.....	19
1.2.1 Влияние формы и размера наночастиц на температуру плавления .....	19
1.3 Определение процесс плавления .....	23
1.3.1 Калорическая кривая .....	23
1.3.2 Радиальная функция распределения .....	26
Вывод.....	29
<b>Глава 2 Методика моделирования .....</b>	<b>30</b>
2.1 Методы математического моделирования .....	30
2.1.1 Метод молекулярной динамики .....	31
2.1.2 Потенциал межатомного взаимодействия.....	32
Вывод.....	33
<b>Глава 3 Экспериментальная часть.....</b>	<b>34</b>
3.1 Построение частиц в LAMMPS .....	34
3.1.1 Построение наночастиц разных форм .....	34
3.1.2 Построение наночастиц разных размеров .....	36
3.2 Построение калорической кривой и определение температуры плавления .	37

3.2.1	Определение температуры плавления наночастиц для разных размеров..	37
3.2.2	Определение температуры плавления наночастиц для разных форм .....	38
3.3	Построение радиальной функции распределения .....	39
3.4	Моделирование процесса плавления наночастиц титана .....	41
3.4.1	Определение температуры плавления наночастиц титана .....	41
3.4.2	Моделирование процесса плавления наночастиц титана .....	46
	Заключение .....	48
	<b>Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение .....</b>	<b>49</b>
	Введение.....	49
4.1	Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	50
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования .....	50
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений .....	50
4.1.3	SWOT-анализ.....	53
4.2	Планирование научно-исследовательских работ.....	56
4.2.1	Структура работ в рамках научного исследования .....	56
4.2.2	Определение трудоемкости выполнения работ .....	59
4.3	Определение бюджета научно-технического исследования .....	60
4.3.1	Расчет материальных затрат НТИ .....	66
4.3.2	Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ .....	68
4.3.3	Основная заработная плата исполнителей темы .....	69
4.3.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) .....	71
4.3.5	Накладные расходы.....	72
4.3.6	Формирование бюджета затрат проекта научно-исследования.....	72

Вывод.....	73
<b>Глава 5 Социальная ответственность .....</b>	<b>74</b>
Введение.....	74
5.1 Производственная безопасность .....	75
5.1.1 Микроклимат .....	75
5.1.2 Производственный шум .....	78
5.1.3 Электромагнитные поля .....	79
5.1.4 Освещенность .....	81
5.1.5 Электробезопасность .....	85
5.1.6 Факторы пожарной и взрывной природы.....	87
5.2 Экологическая безопасность.....	90
5.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	91
5.3 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	92
Вывод.....	93
Заключение.....	95
<b>Список использованных источников .....</b>	<b>96</b>

## ***ВВЕДЕНИЕ***

Наноматериалы наиболее многообещающие новые материалы, известные с начала 21-го века. Поскольку материал микронизируется на нано-масштабе, его размер можно сравнить с длиной волны Де Бройля электрона, сверхпроводящей когерентности и радиусом экситона, а поверхностная электронная структура и кристаллическая структура значительно изменяются [1]. Благодаря этому наноматериал имеет необычные физические и химические свойства, которых у традиционных материалов нет. Однако в настоящее время трудно подготовить и охарактеризовать мелкоразмерные наноматериалы. В процессе плавления наноматериалов сложнее получить информацию об изменении атомной структуры с помощью эксперимента. Например, плавление наночастиц является сложным термодинамическим процессом [2]. Кроме того, практически отсутствует информация об изменениях в структуре наночастиц, поэтому выявление механизма плавления способствует совершенствованию технологии в смежных областях, которая имеет высокую научную значимость и перспективу применения.

До сих пор из экспериментов не было получено точных сведений о характеристиках распределения наночастиц по энергиям, но эти характеристики имеют решающие значения для понимания плавления наночастиц и их размерного эффекта. Математическое моделирование по программе молекулярной динамики рассматривает частицу на атомном уровне и позволяет решить эту задачу.

Метод молекулярной динамики (МД) является одним из широко используемых методов компьютерного моделирования физических процессов в материаловедении. В методе молекулярной динамики движение частиц и соответственно эволюция материала определяется основным уравнением динамики (уравнением Ньютона) и в модель не нужно дополнительно вводить представление о механизме процесса. В работе расчеты были произведены в программе LAMMPS [3]. Для анализа результатов расчета использовались программы Ovito [4] и Wolfram Mathematica [5].

В этой связи, целью работы являлось: исследование плавления наночастиц титана различного радиуса методом молекулярной динамики.

В результате работы были решены следующие задачи:

1. Построение наночастиц разных форм для меди и титана и расчет их свойств.
2. Моделирование процесса спекания наночастиц титана.
3. Определение температуры плавления наночастиц меди и титана с помощью калорической кривой, и радиальной функции распределения.
4. Определение зависимости температуры плавления наночастиц титана от радиуса частицы.

Научная новизна работы состоит в том, что впервые исследованы изменения структурных и энергетических характеристик наночастиц титана в процессе плавления методом молекулярной динамики.



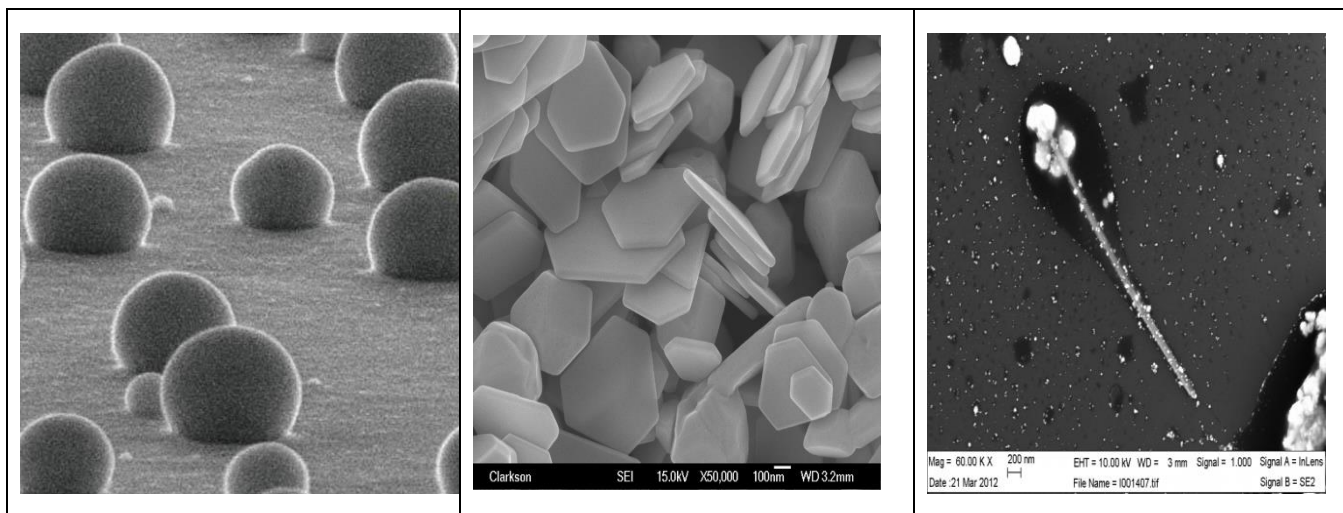
## *Глава 1 Литературный обзор*

### *1.1 Наночастицы*

#### *1.1.1 Наночастицы и кластеры.*

Кластеры и наночастицы – это частицы твердого тела малых размеров, состоящие из небольшого числа атомов – от нескольких десятков до десятков тысяч штук. Деление на кластеры и наночастицы – условное, обычно кластеры содержат меньшее число атомов и соотношение между атомами поверхности и атомами объема у них примерно один к одному.

Размер наночастиц, обычно порядка десяти нанометров и число объемных атомов больше на порядок, чем число поверхностных.



*Рисунок 1. Наночастицы: 1) Наночастицы платины, 2) Пластины серебра, 3) Нанотрубка с частицами золота [6].*

Большое количество поверхностных атомов изменяет физические свойства наночастиц по сравнению с массивными образцами. Отличие свойств малых частиц от свойств массивных образцов широко применяется в науке и технике. Порошки из наночастиц работают в качестве катализаторов существенно лучше, чем массивные образцы из тех же материалов. Введение

малых металлических частиц внутри керамических материалов придает этим материалам (керметам) уникальные механические свойства, поэтому они широко применяются в авиастроении. Порошки металлов могут быть использованы в аддитивных технологиях, как материал для 3д печати.

Кроме того, от размера частиц вещества могут существенно зависеть термодинамические свойства материала. К термодинамическим свойствам относится: температура, плотность, теплоемкость, вязкость, давление, объем и другие.

### ***1.1.2 Свойства наночастиц***

Наиболее сильные изменения свойств наноматериалов и наночастиц наступают в диапазоне размеров кристаллитов порядка 10...100нм. Для наночастиц доля атомов, находящихся в тонком поверхностном слое ( $\sim 1$  нм), по сравнению с микрочастицами заметно возрастает. Так, например, оказывается, что наночастицы некоторых материалов имеют очень хорошие каталитические и адсорбционные свойства. Другие материалы показывают удивительные оптические свойства, например, сверхтонкие пленки органических материалов применяют для производства солнечных батарей. Такие батареи, хоть и обладают сравнительно низкой квантовой эффективностью, зато более дешевы и могут быть механически гибкими. Удастся добиться взаимодействия искусственных наночастиц с природными объектами наноразмеров — белками, нуклеиновыми кислотами и др. Тщательно очищенные, наночастицы могут самовыстраиваться в определенные структуры. Такая структура содержит строго

упорядоченные наночастицы и также зачастую проявляет необычные свойства [7].

## ***1.2 Процесс плавления***

Точкой плавления твердого тела является температура, при которой он изменяется от твердого состояния к жидкому. В точке плавления твердая и жидкая фазы сосуществуют в равновесии. Таким образом, плавление материала является характеристикой вещества и может быть использовано для его идентификации [8].

Известно, температура плавления наночастиц критически зависит от их размеров и геометрической формы.

### ***1.2.1 Влияние формы и размера наночастиц на температуру плавления***

В работе [9] описывались исследования зависимости температуры плавления наночастицы от ее формы. Когда наночастицы переходят из твердого состояния в жидкое с увеличением температуры, у поверхности жидкого слоя ещё существует состояние твердое. Таким плавлением обусловлено наличие поверхностного натяжения, которое отражает взаимодействие между жидком и твердом и изменяет энергию системы.

Сначала рассмотрим изолированную частицу маленького размера. Используем метод Гиббса исследовать искривлённую поверхность конденсированной фазы. Уравнению Гиббса:

$$\frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln R} = \frac{\frac{2\sigma}{R}(1 + \frac{\sigma}{R} + \frac{1\sigma^2}{3R^2})}{1 + \frac{2\sigma}{R}(1 + \frac{\sigma}{R} + \frac{1\sigma^2}{3R^2})} \quad (1)$$

где  $\sigma$  — поверхностное натяжение и  $R$  — радиус частицы,  $\delta$  — постоянная Толмена.

В общем случае уравнение (1) нельзя решить в явном виде. Условие для решения этого уравнения:  $R \gg \delta$ , в этом случае можно поменять уравнение на следующей форму:

$$\sigma = \frac{\sigma^{(\infty)}}{\frac{2\sigma}{R}} \quad (2)$$

где  $\sigma^{(\infty)}$  — напряжение плоской поверхности.

Однако, решение уравнения (1) показывает, когда  $R$  не влияет на  $\delta$  можно применить выражение:

$$\sigma = \frac{\sigma^{(\infty)}}{\frac{2\sigma}{R}} \exp\left(-\sum_{k=1}^3 \frac{x_k^2 \ln(\frac{R}{\delta} - x_k)}{3x_k^2 + 4x_k + 2}\right) \quad (3)$$

По сравнению с (3), (2) даёт более точный результат, поэтому из численное решение (3) без существенной потери точности может быть заменено асимптотическим выражением.

$$\sigma = \sigma^{(\infty)} \exp\left(-\frac{4\delta}{\delta + 2R}\right) \quad (4)$$

Натяжение поверхности твёрдого тела определено связями между атомами и прямо пропорциональной температуре плавления. Благодаря этому, температура плавления получится:

$$T_m = T_m^{(\infty)} \exp\left(-\frac{4\delta}{\delta + 2R}\right), T_m^{(\infty)} = \frac{\sigma^{(\infty)} V}{C_p L} \quad (5)$$

где  $T_m^{(\infty)}$  — температура плавления образца,  $V$  — молярный объём,  $L$  — толщина первой координационной сферы,  $C_p$  — теплоёмкость при постоянном давлении. Это выражение совпадает с выражением по форме, которое получается в модели Дебая. На основе константы Толмена, можно оценить из следующего условия [1].

$$4\pi\left(\frac{\delta}{2}\right)^2 d = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\delta}{2}\right)^2 \quad (6)$$

где  $d$  - высота монослоя атомов, под этим условием критический размер построен. Критический размер только состоит из одного поверхностного атомного слоя.

$$\delta = 6d \quad (7)$$

Константа  $\delta$  зависит от изменения температуры с изменением размера наночастиц [10-11]. К примеру, на рисунке 2 показана зависимость температуры плавления от формы частиц титана.

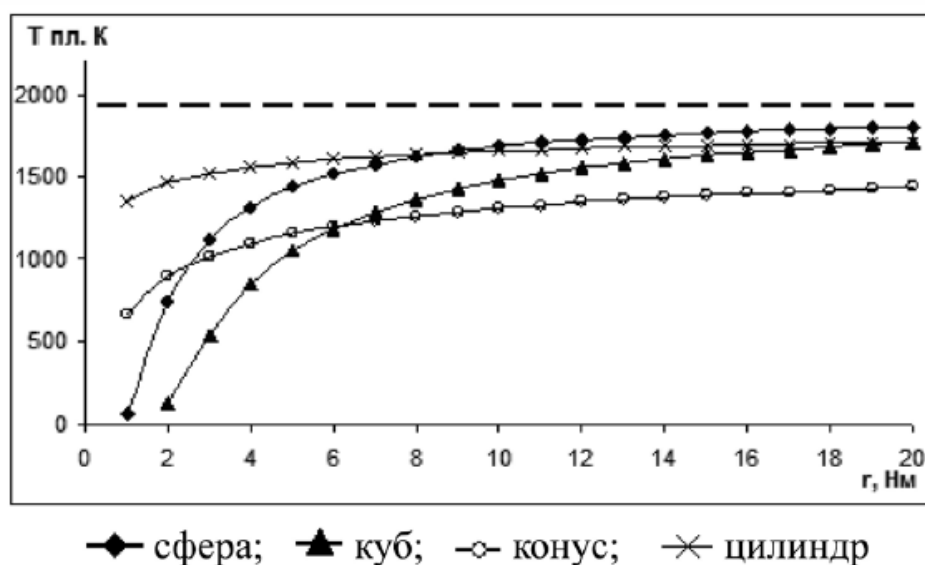


Рис.2. Зависимость температуры плавления наночастиц титана от разных форм наночастиц.

Потом исследована зависимость температуры плавления титана в разных матрицах от разных форм наночастиц.

Рассчитав параметры  $\alpha$  с помощью выражения (3), получен параметр наночастиц ванадия  $\alpha = 1,84$ , и параметр наночастиц титана в матрице никели равен 0,14.

С помощью форм (2) можно получить результат и результат показан на рисунке 3 и 4.

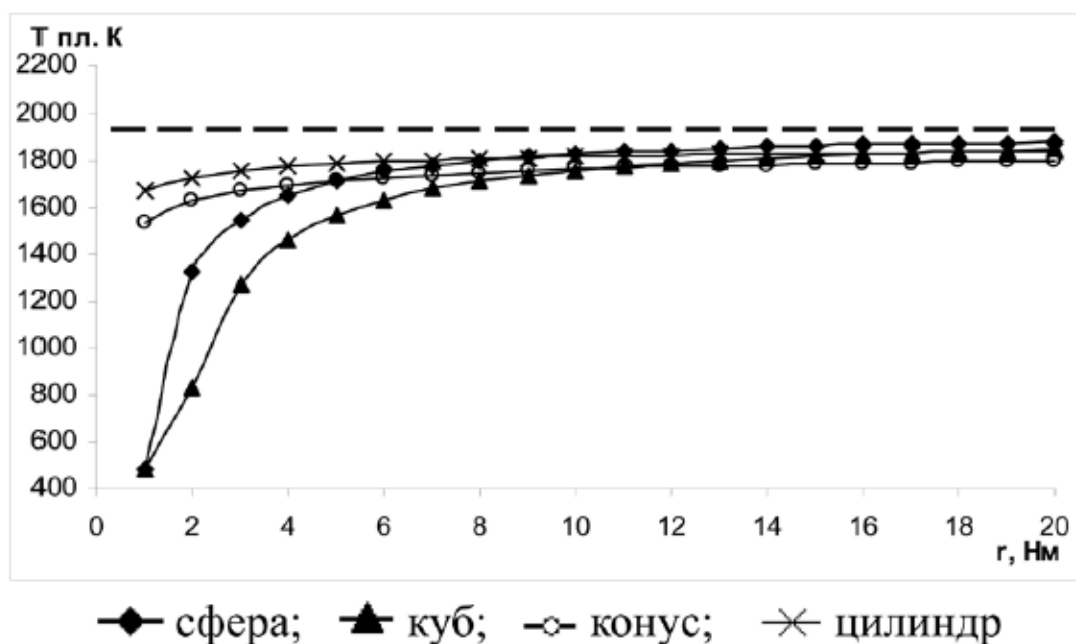


Рис.3. Зависимость температуры плавления наночастиц титана в ванадии от разных форм наночастиц.

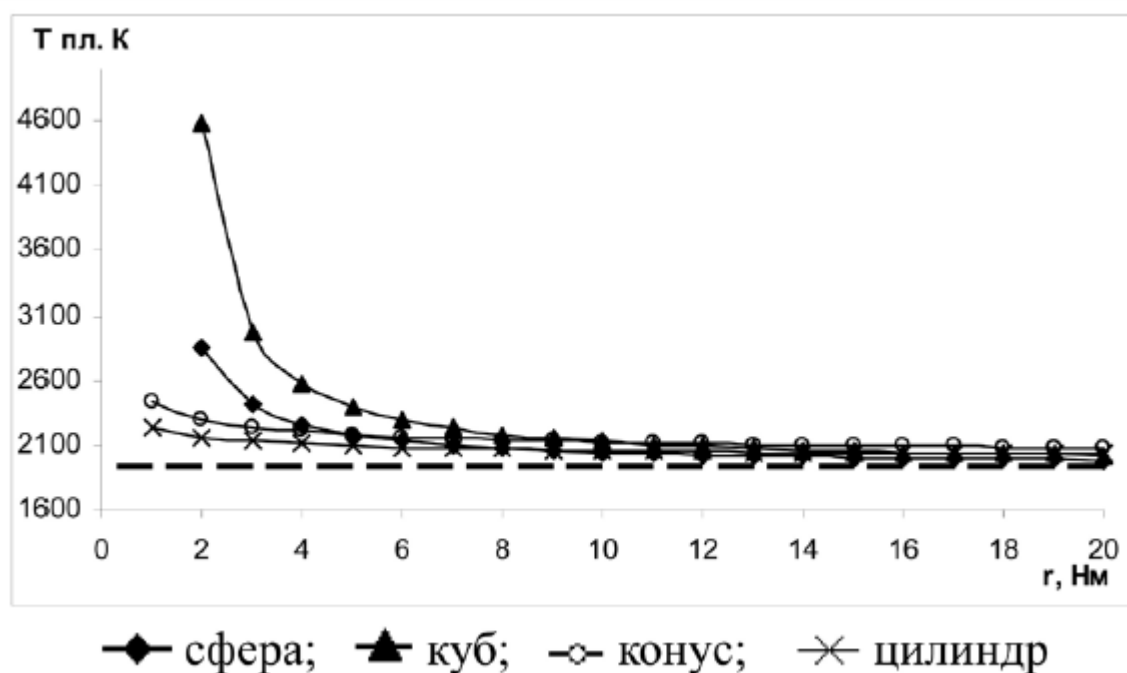


Рис.4. Зависимость температуры плавления наночастиц титана в никеле от разных форм наночастиц.

В рисунке 2 можно увидеть, что при форме цилиндру изменение температуры плавления наночастиц более устойчивое, и менее устойчивое изменение температуры плавления наночастиц при форме сфере. Можно увидеть,

что при размерах радиуса 10 нм температура плавления наночастиц по форме сфере сильно уменьшается. С размера 18 нм температура плавления наночастиц по форме кубу значительно уменьшается. По форме конусу изменение температуры плавления наночастиц при разных размерах самое неустойчивое. С размера 70 нм температура плавления наночастиц с формой конуса начинается незначительно измениться. Это явление объясняется в том, что связи между наночастицами конуса очень слабые. Когда вершина и основание конуса разрушатся, форма наночастиц изменяется похоже на форму цилиндра и начинается плавиться по механизму плавления наночастиц по форме цилиндру.

В рисунке 3 можно увидеть, что температура плавления наночастиц по форме сфере и кубу одинаковая при размере 1 нм. Можно предложить, что, когда куб плавится его ребер и углы меняются на сферу. Наночастицы, у которых есть формы цилиндра и конуса, менее интенсивно уменьшается температура плавления.

В рисунке 4 можно увидеть, что с увеличением размера наночастиц, температура плавления наночастиц уменьшается. В данном случае можно видеть, что взаимодействие между атомами титана и никеля более сильное, чем между атомами титана.

### ***1.3 Определение процесса плавления***

#### ***1.3.1 Калорическая кривая***

Калорическая кривая – зависимость потенциальной энергии системы от температуры. Обычно, фазовый переход можно обнаружить по наличию излома на калорической кривой.

Определить температуру плавления объемного кристалла с помощью калорической кривой нельзя, потому что при моделировании кристалл не содержит зародыши жидкой фазы и фазовый переход на кривой появляется при

более высокой температуре. Для малых частиц возможно определение температуры плавления с помощью калорической кривой [6].

Дело в том, что большое число поверхностных атомов, обладающих повышенной энергией, способствует появлению в наночастицах при нагреве жидкой фазы вблизи поверхности. По этой причине, в наночастицах можно моделировать фазовые переходы плавления и кристаллизации непосредственным нагреванием или охлаждением. Для моделирования процесса плавления, нужно, чтобы модель прошла несколько стадий: образование зародыша жидкой фазы, плавление всего кристалла, установление равновесия в жидкой фазе. Чтобы прошли все эти стадии, расчет модели должен осуществляться достаточно длительное время. Например, для кластеров, содержащих до 1000 атомов, достаточно порядка 40000 шагов, чтобы плавление происходило. В модели необходимо рассчитать энергии системы для каждой температуры и построить калорическую кривую. По скачку на калориметрической кривой можно определить точку фазового перехода.

Фазовый переход плавления достаточно легко может быть смоделирован с помощью МД. Алгоритм моделирования следующий. Строится исходная модель частицы с заданной формой и размером. Производится релаксация (минимизация энергии) при  $T=0$  К. Затем производится релаксация системы при разных постоянных значениях температуры. При температурах, далеких от температуры плавления, обычно бывает достаточной релаксация в интервале времени порядка 30-50 пс. После этого определяется полная энергия атомной



системы, равная сумме потенциальной и кинетической энергий всех атомов, которая представляет собой внутреннюю энергию малой частицы. Прodelав это для ряда значений температуры, строят калорическую кривую, анализ которой и позволяет найти температуру плавления.

Пример такого исследования приведен на рисунке 5, на котором изображены калорические кривые малых частиц золота, содержащих 219, 477, 879 атомов, и объемного кристалла (ввиду описанного выше отличия плавления малых частиц и объемного кристалла, для последнего калориметрическая кривая определена другим способом).

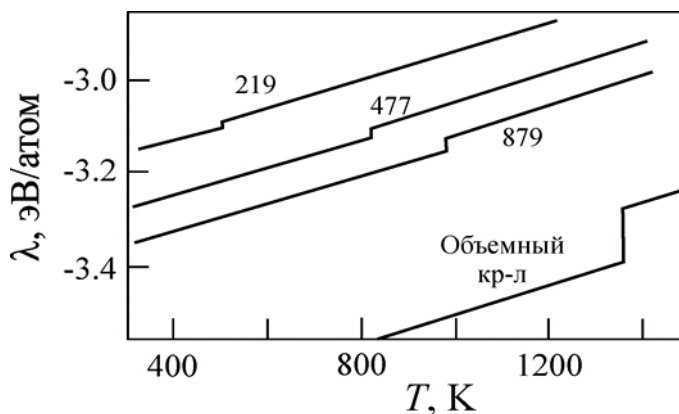


Рисунок 5. Калорическая кривая [12].

В работе [13] описано исследование плавления наночастиц меди и определена температура плавления наночастиц меди с помощью калорической кривой, диаметр которых изменяется от 2 нм до 10 нм. Калорические кривые показаны в рисунке 6, можно определить, что температуру плавления наночастиц меди: 2нм: ТПЛ= 700К, 4нм: ТПЛ= 900К, 6нм: ТПЛ= 1000К, 8нм: ТПЛ= 1000К и 10нм: ТПЛ= 1000К.

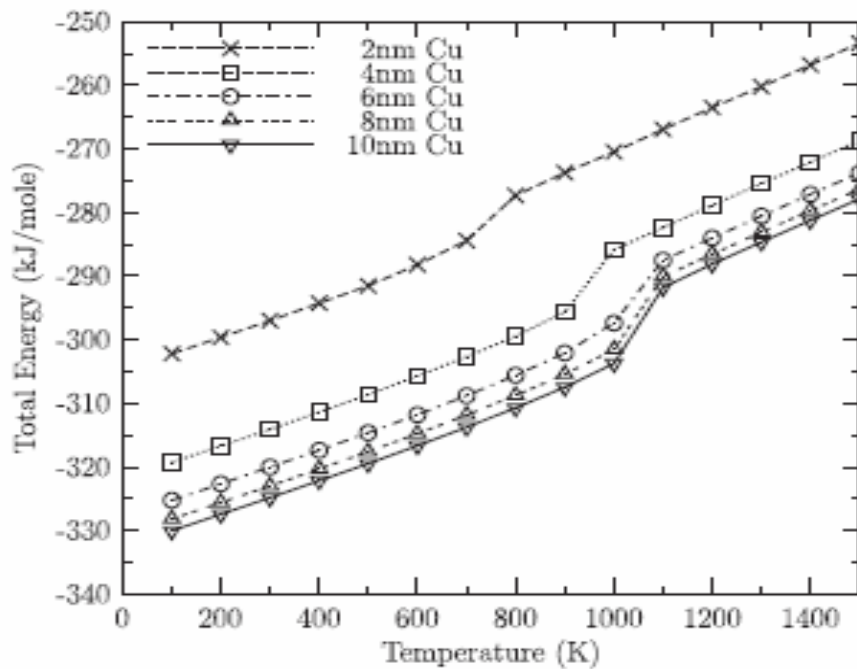


Рисунок 6. Зависимость потенциальной энергии от температуры для наночастиц меди разных размеров [13].

### 1.3.2 Радиальная функция распределения

В статистической механике радиальная функция распределения (radial distribution function, RDF) в системе частиц (атом, молекула, коллоид, ...) представляет собой плотность частиц в эталонной частице.

Радиальная функция распределения  $g(r)$  относится к координатам данной частицы, к вероятности других частиц в распределении пространства. Таким образом, радиальная функция распределения использована для изучения порядка материи и использована для описания электронной корреляции.

В работе радиальная функция распределения использована для исследования изменения структуры меди в процессе плавления. Физическое

значение радиальной функции распределения показано на рисунке 7. В рисунке черный шар представляет собой одну молекулу в системе, который называется целевой молекулой. Сумма молекул, расстояние от которых до центра целевой молекулой ( $r \rightarrow r + dr$ ) по прямой, равно  $dN$ .

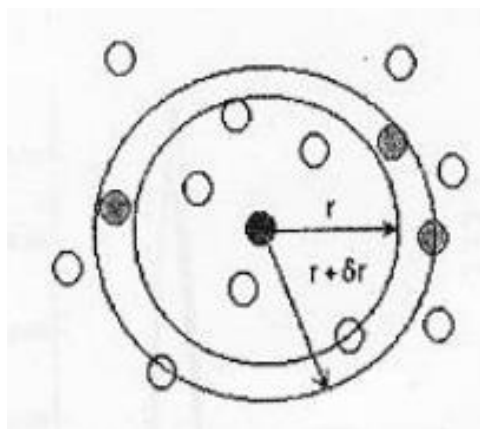


Рисунок 7. Принципиальная схема радиальной функции распределения [14].

Радиальная функция распределения определена по форме:

$$\rho g(r) 4\pi r^2 = dN \quad (1-1)$$

где  $\rho$  — плотность системы,  $g(r)$  — вероятность нахождения атома в диапазоне  $r$  до  $r + dr$ ,  $\delta$  — знак Dirac,  $r$  — положение атома. Если сумма молекул равно  $N$ , то из связи показана выше можно получить:

$$\int_0^\infty \rho g(r) 4\pi r^2 dr = \int_0^N dN = N \quad (1-2)$$

Из уравнения 1-1 можно получить отношение радиальной функции от  $dN$ ,

$$g(r) = \frac{dN}{\rho 4\pi r^2} \quad (1-3)$$

Радиальная функция распределения может объясняться как степень локальной плотности (local density) и средней плотности (bulk density). Форма вычисления радиальной функции распределения:

$$g(r) = \frac{1}{\rho 4\pi r^2} \frac{\sum_{t=1}^T \sum_{j=1}^N \Delta N(r \rightarrow r + \delta r)}{N \times T} \quad (1-4)$$

где  $N$  — число молекул,  $T$  — время (шаг) вычисления,  $\delta r$  — определенная разница расстояния,  $\Delta N$  — сумма молекул нахождения в диапазоне  $r$  до  $r + dr$ .

В работе [13] описано исследование плавления наночастиц меди и определена температура плавления наночастиц меди, диаметр которых изменяется от 2 нм до 10 нм.

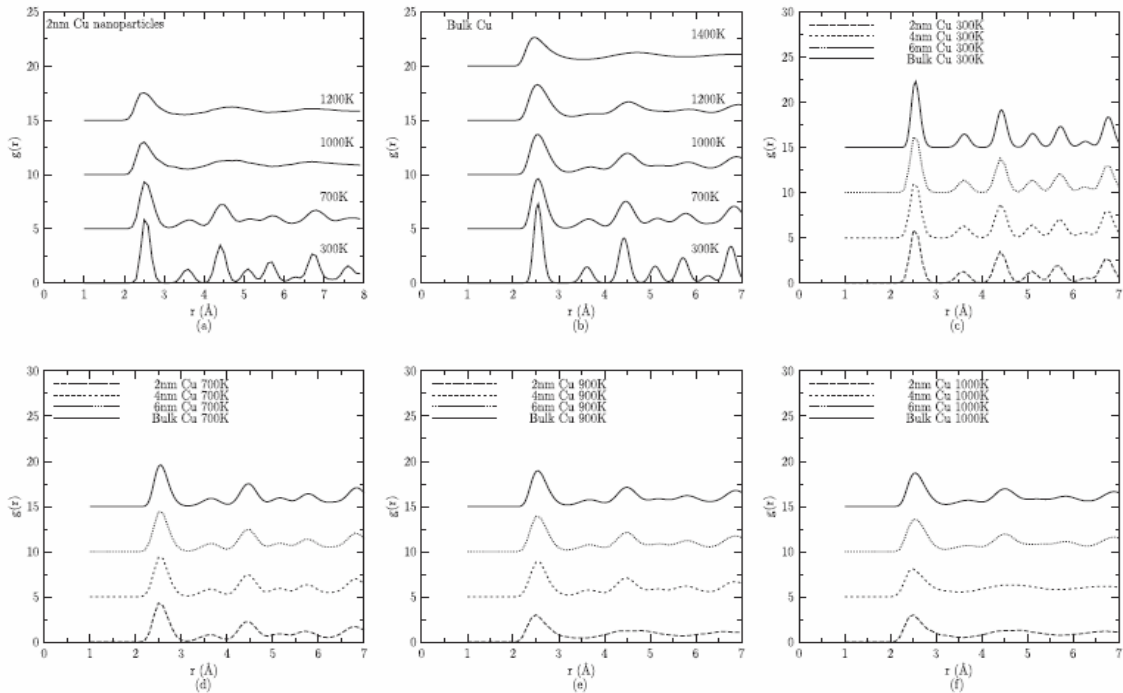


Рисунок 8. Поведение радиальной функции распределения для различных размеров наночастиц меди при различных температурах (а) 2 нм, (б) объемная Cu и сравнение различных размеров наночастиц с объемной медью при (с) 300 K, (d) 700 K, (e) 900 K, (f) 1000 K [13].

### ***Вывод***

В первой главе проведен анализ литературной данных полученных другими авторами по температуре плавления наночастиц меди. В статье показаны две исследованные инструменты: калорическая кривая и радиальная функция распределения. Указано, что температура плавления наночастиц меди увеличатся с увеличением радиусом.

## *Глава 2 Методика моделирования*

### *2.1 Методы математического моделирования*

Математическое моделирование – это использование математических знаков, формул, программ и графиков для решения задач науки и техники. С помощью математического моделирования, мы можем получить образное представление о предмете и ясно определить задачу.

Существует множество различных методов моделирования вещества и процессов в веществе.

Модели удобно разделить на масштабном уровне:

1. Первопринципные расчеты. Это нижний уровень, они основываются на уравнении Шредингера, считают распределение электронной плотности в атомах. Можно оценить энергию различных структур из атомов.

2. Метод молекулярной динамики. В этом методе эволюция системы атомов рассчитывается посредством решения системы уравнений динамики, которые записываются для каждого атома. В качестве уравнения динамики в классической МД используется уравнение второго закона Ньютона. Существует также квантовая МД, для нее уравнение движения - уравнение Шредингера.

3. Имитационное моделирование. Здесь есть различные варианты – это метод Монте-Карло, клеточные автоматы, решеточные модели, модель Изинга, случайные блуждания и т.п. Здесь необходимо задавать набор возможных реакций и их вероятности. Моделируется, в основном кинетика реакции.

4. Модели, основанные на дифференциальных уравнениях. Чаще всего

это модели сплошной среды, не учитывающие атомарный уровень и микроструктуру вещества [15].

### ***2.1.1 Метод молекулярной динамики***

Методы моделирования можно разделить на модели сплошной среды и атомистические модели. Методы сплошной среды рассматривают вещество без учета атомарной структуры. Атомистические модели учитывают атомную структуру. Самый распространенный атомистический метод – это метод молекулярной динамики [16].

Метод молекулярной динамики - это техники, которые применяют для моделирования явлений в физике. Движение атомов в методе молекулярной динамики определяется с помощью второго закона Ньютона:

$$\vec{F} = \vec{a} m \quad (2-1)$$

где  $\vec{a}$  ускорение тела,  $\vec{F}$  сила, которая приложится к телу,  $m$  масса материальной точки.

МД моделирует движение и взаимодействия между частицами.

По методу МД можно оценивать и определять свойства и состояния молекул и атомов:

Мы определим траекторию движения по закону Ньютона. А потом используем методы в физике, чтобы определить свойства и состояния молекул и атомов.

Основные части программы для моделирования методом МД:

1. Построение атомной структуры образца

2. Задание потенциала взаимодействия
3. Задание граничных и начальных условий
4. Решение системы уравнений движения

### ***2.1.2 Потенциал межатомного взаимодействия***

Потенциал: это модель энергии взаимодействия двух атомов, которую можно записать в виде формулы  $U(r)$ . Где  $U$  – это энергия взаимодействия двух атомов в зависимости от расстояния между ними [17].

Потенциал взаимодействия  $U(r)$  бывают парные и многочастичные. В парных потенциалах учитывается только энергия пары атомов без учета влияния соседних атомов. Примеры парных потенциалов

Потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2-2)$$

где  $\sigma$  и  $\varepsilon$  -постоянные коэффициенты ,имеющие размерности длины и энергии , соответственно.

Потенциал Морзе:

$$U(r_{ij}) = \varepsilon \left[ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (2-3)$$

где  $\varepsilon$ ,  $\alpha$  и  $r_0$  позволяет подгонять потенциал, вдобавок к энергии связи и параметру решетки, к модулю всестороннего сжатия в кристалле.

Многочастичные потенциалы учитывают влияние соседних атомов на энергию парного взаимодействия. Примеры многочастичных потенциалов:



Метод погруженного атома (МПА):

в МПА энергия определяется по форме:

$$E_i = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_i \varphi(i) \quad (2-4)$$

где  $\varphi$  - энергия парного взаимодействия,  $\rho$ - электронная плотность,  $F$ - функция погружения.

### ***Вывод***

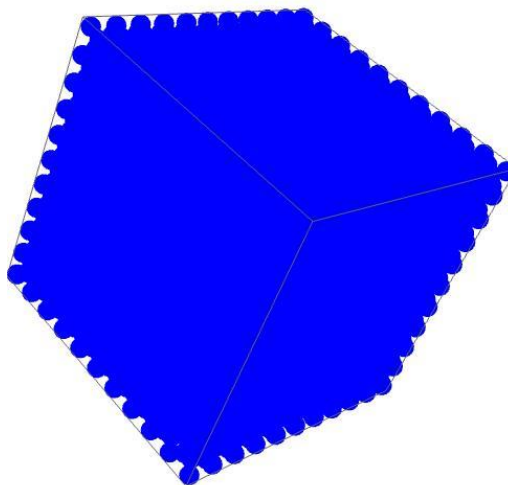
В второй части показан метод молекулярной динамики и программы LAMMPS. В данной работе использован метод МД для моделирования процесса плавления и использована программа LAMMPS для выполнения метода МД.

## *Глава 3 Экспериментальная часть*

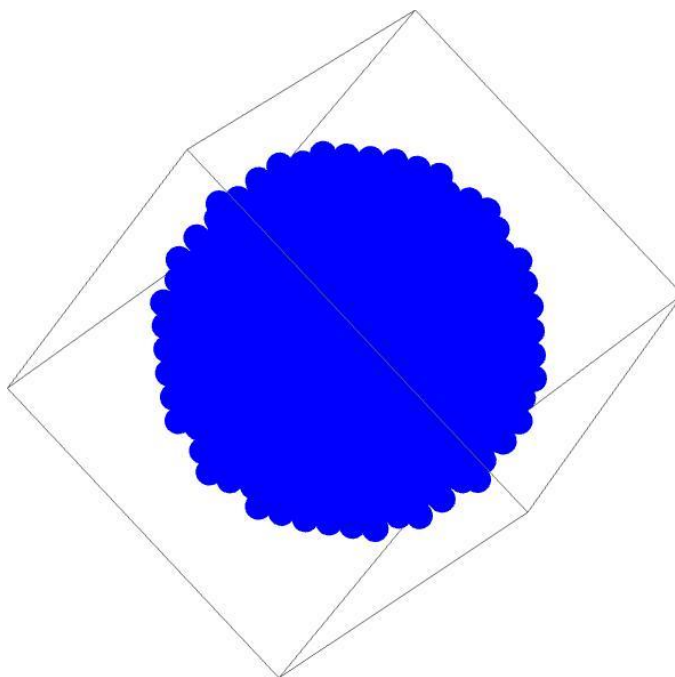
### *3.1 Построение частиц в LAMMPS*

#### *3.1.1 Построение наночастиц разных форм*

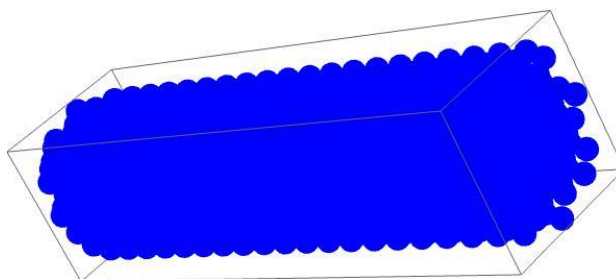
Для исследования плавления наночастиц, необходимо узнать влияние формы наночастиц на температуру плавления, поэтому в данной работе были построены наночастицы разных форм для алюминия с помощью программы LAMMPS. Как показаны следующие рисунки 9-12, с помощью программы LAMMPS были построены наночастицы с разной формой (куб, сфера, цилиндр и конус). В том числе, параметры куба:  $10 \times 10 \times 10 \text{ \AA}$ , сферы: радиус равен  $5 \text{ \AA}$ , цилиндра: радиус равен  $5 \text{ \AA}$  и высота равна  $20 \text{ \AA}$  и конуса: радиус равен  $20 \text{ \AA}$ , и высота равна  $80 \text{ \AA}$ .



*Рисунок 9. Куб:  $10 \times 10 \times 10 \text{ \AA}$ , 4631 атом*



*Рисунок 10. Сфера: радиус=5 Å, 2123 атомы*



*Рисунок 11. Цилиндр: радиус=5 Å, высота=20 Å, 1620 атомов*

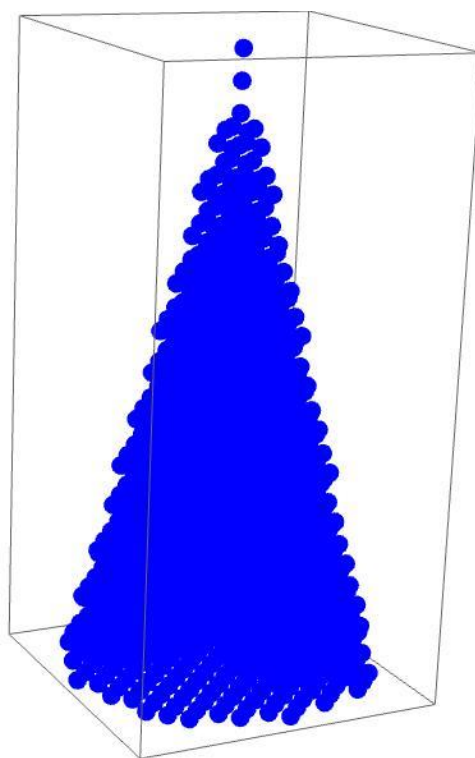


Рисунок 12. Конус: радиус= $20 \text{ \AA}$ , высота= $80 \text{ \AA}$ , 2197 атомов

### 3.1.2 Построение наночастиц разных размеров

В данной работе, чтобы исследовать влияние размера на императоры плавления, были построены наночастицы разных размеров для меди (показаны на рисунке 13) с помощью программы LAMMPS.

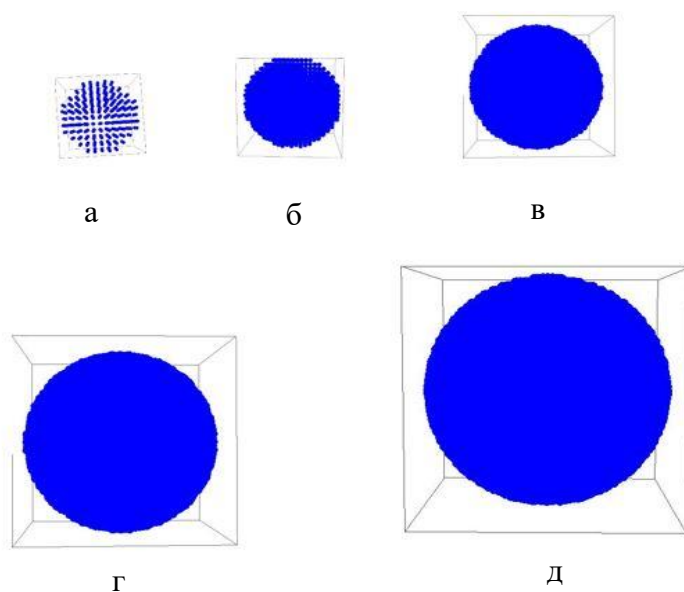


Рисунок 13. Модель наночастиц меди разных размеров с радиусом:

36

а - 2нм, б - 4нм, в - 6нм, г - 8нм, д - 10нм.

### ***3.2 Построение калорической кривой и определение температуры плавления***

#### ***3.2.1 Определение температуры плавления наночастиц для разных размеров***

В данной работе, чтобы определить температуры плавления меди для разных размеров, использована калорическая кривая. Как показана в рисунке 14, в работе были построены калорические кривые наночастиц меди для разных размеров (2 нм, 4 нм и 6 нм). При калорической кривой наночастиц меди с радиусом 2 нм, можно увидеть, что перед температурой 700 К потенциальная энергия увеличивается линейно. Когда температура поднимается до 700 К, потенциальная энергия резко увеличивается. А после 700 К, потенциальная энергия опять растет линейно. Поэтому, можно определить температуру плавления наночастиц меди с радиусом 2 нм:  $T_{пл}=700\text{К}$ . А также, можно определить температуру плавления наночастиц с радиусом 4 нм: 900 К и температуру плавления наночастиц с радиусом 6 нм: 1000 К.

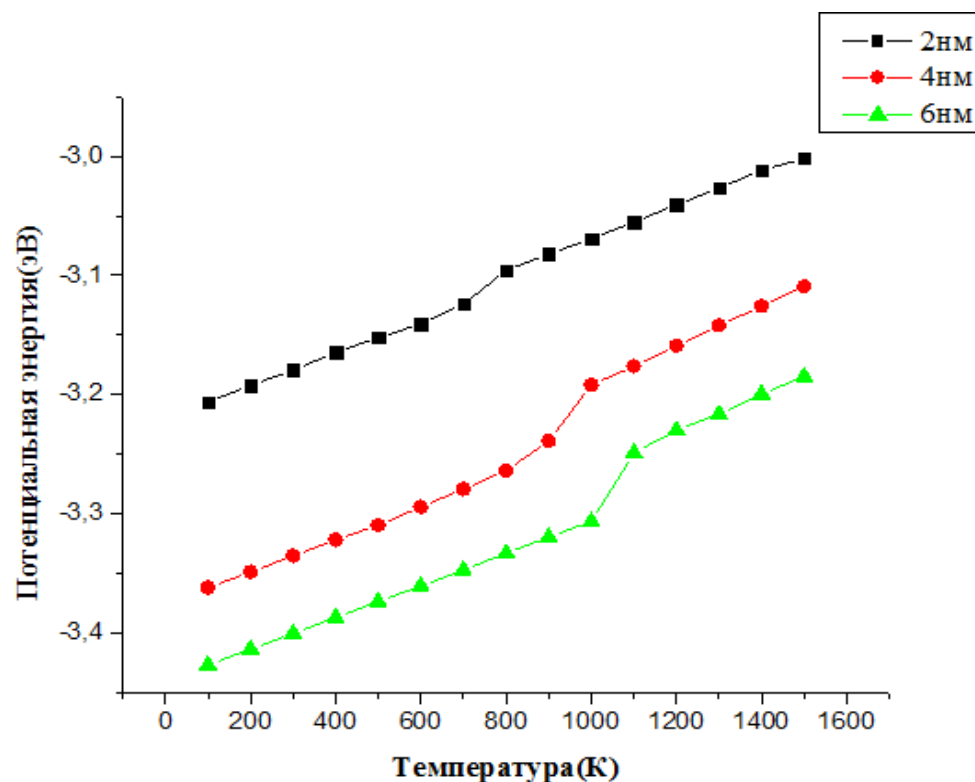


Рисунок 14. Зависимость температуры от потенциальной энергии меди

### 3.2.2 Определение температуры плавления наночастиц для разных форм.

В данной работе были построены калорические кривые для наночастиц алюминия разных форм. Как показано на рисунке 15, можно определить температуру плавления для алюминия куб:800К, сфера 800К, цилиндр:900К И конус: 1000К.

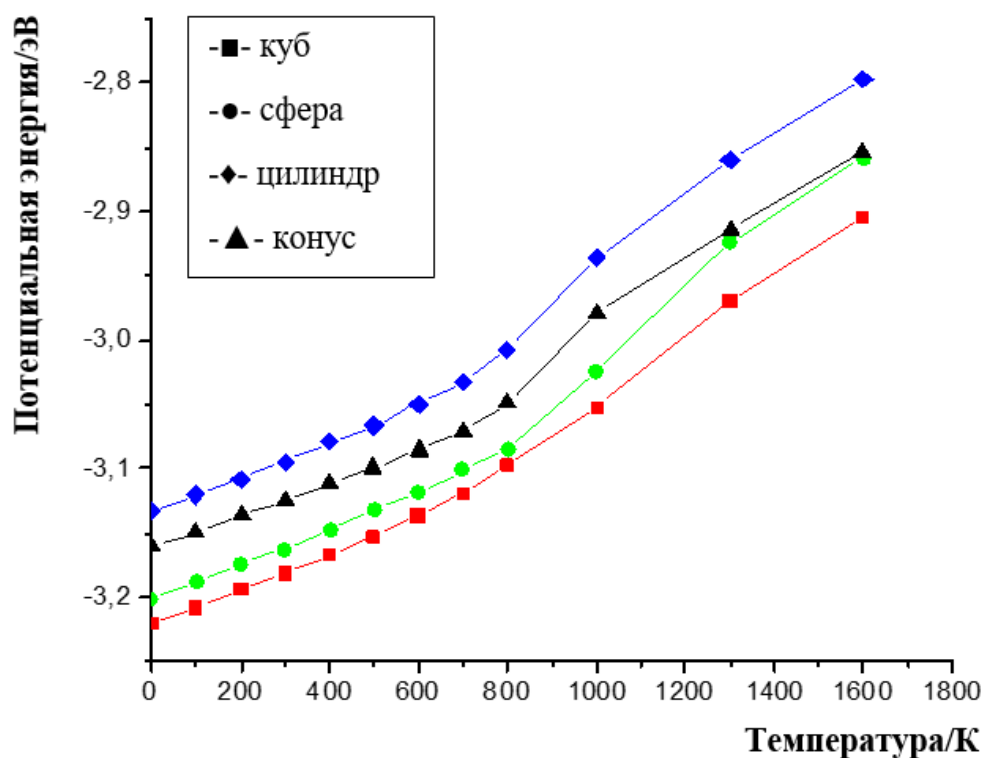


Рисунок 15. Зависимость потенциальной энергии от температуры для наночастиц алюминия разных форм

### 3.3 Построение радиальной функции распределения и определение температуры плавления

В данной работе, были построены рисунки радиальных функций распределения для меди разных размеров. Из рисунка 16 видно, что по мере увеличения температуры пиковое значение функции постепенно уменьшается, а пик увеличивается или даже исчезает. Когда температура составляет 700 К, Второй и четвертый пик полностью исчезли, и два пика все еще существуют при температуре 300 К. Вышеприведенные результаты показывают, что структура металла Си происходит от упорядоченной до неупорядоченной твердофазной фазы при 700 К. Переменная температура плавления тела около 700 К. А также,

при рисунках 17 и 18 можно определить температуру плавления для наночастиц меди с радиусом 4нм:  $T = 900\text{K}$  и для наночастиц меди с радиусом 6нм:  $T = 1000\text{K}$ .

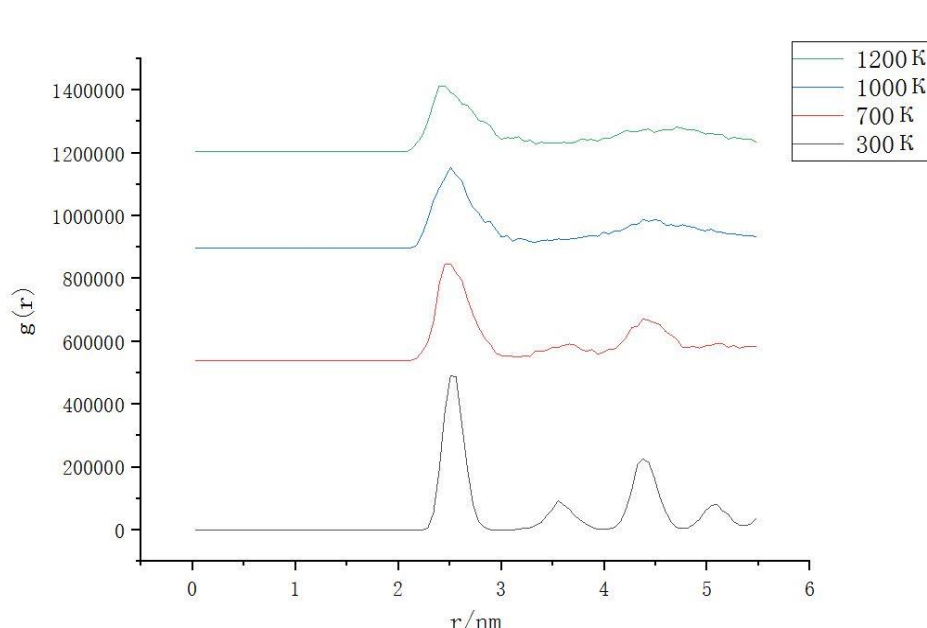


Рисунок 16. Радиальная функция распределения для наночастиц меди с радиусом 2нм.

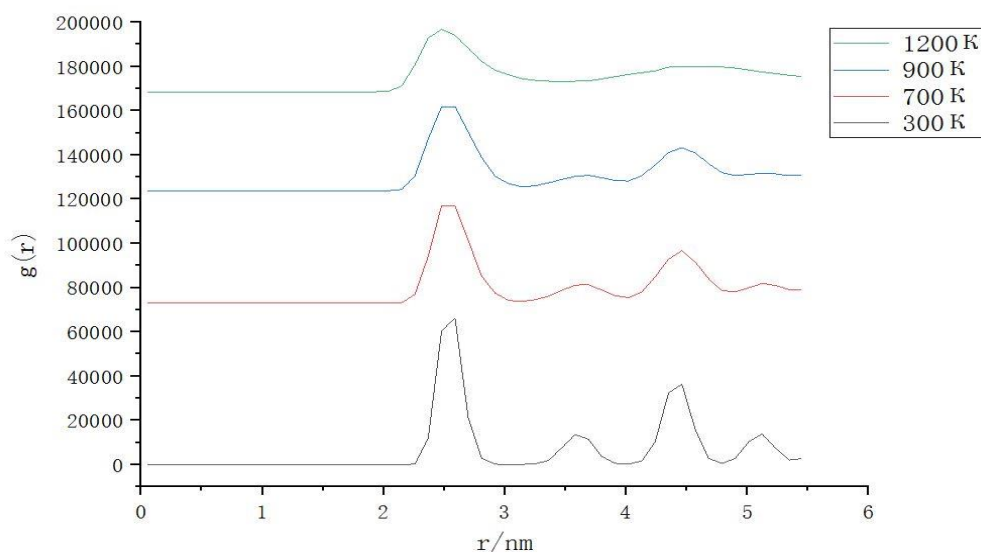


Рисунок 17. Радиальная функция распределения для наночастиц меди с радиусом 4нм.



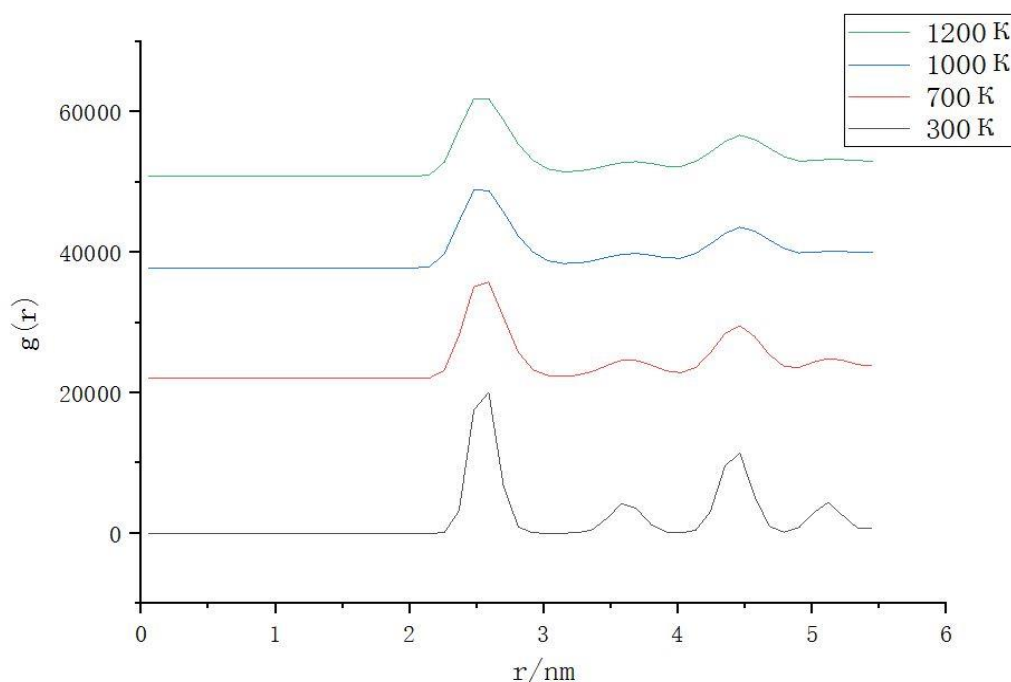


Рисунок 18. Радиальная функция распределения для наночастиц меди с радиусом 6 нм.

### 3.4 Моделирование процесса плавления наночастиц титана

#### 3.4.1 Определение температуры плавления наночастиц титана

В предыдущих экспериментах мы использовали метод моделирования молекулярной динамики для создания нанометровой модели алюминия и меди и провели молекулярно-динамическое моделирование поведения плавления наночастиц меди. Экспериментальные результаты согласуются с известными данными плавления меди, которые проверяют точность метода моделирования молекулярной динамики. Затем мы моделировали поведение плавления частиц нанотитана. Мы провели эксперименты на наночастицах титана с радиусами частиц 2 нм, 4 нм и 6 нм соответственно и получили следующие данные.

Калорическая кривая для наночастиц титана радиусом 2нм, 4нм и 6нм показана на рисунке 19. Для наночастиц титана радиусом 2нм, можно видеть, что перед температурой 1000К потенциальная энергия увеличатся линейно. Когда температура подниматься до 1000К, потенциальная энергия вдруг увеличатся. А после 1000К, потенциальная энергия опять увеличатся линейно. Поэтому, можно определить температуру плавления наночастиц меди с радиусом 2нм:  $T_{пл}=1000K$ . А также, можно определить температуру плавления наночастиц с радиусом 4нм: 1300К, температуру плавления наночастиц с радиусом 6нм: 1400К и температуру плавления наночастиц титана с радиусом 10нм: 1500К.

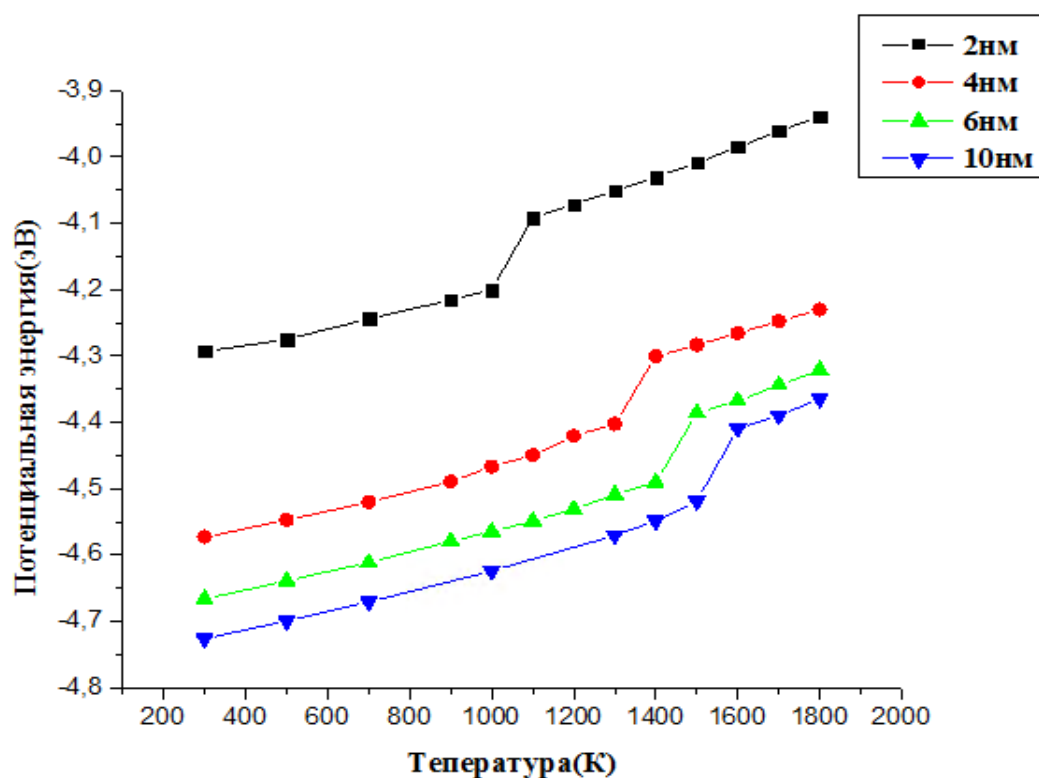


Рисунок 19. Калорическая кривая для наночастиц титана радиусом 2нм, 4нм, 6нм и 10нм.

На рисунке 20, 21 и 22 показаны радиальные функции распределения наночастиц титана радиусом 2нм, 4нм и 6нм. На рисунке 20 второй пик и четвертый пик исчезают при температуре 1000К, потому что наночастицы титана переходят из твёрдой фазы в жидкую фазу. Температура плавления наночастиц титана радиусом 2нм равна 1000К. Так же, при рисунке 21 и 22 можно определить температуру плавления наночастиц титана радиусом 4нм и 6нм соответственно равна 1300К и 1400К.

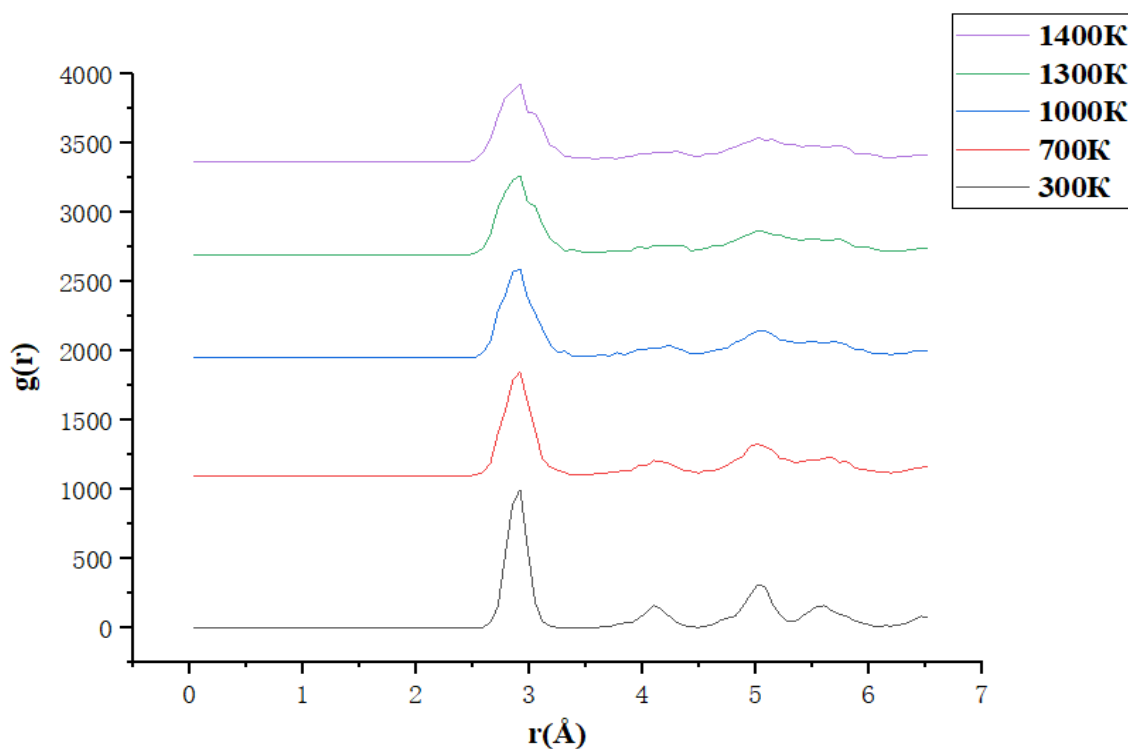


Рисунок 20. РФР для наночастиц титана радиусом 2нм.

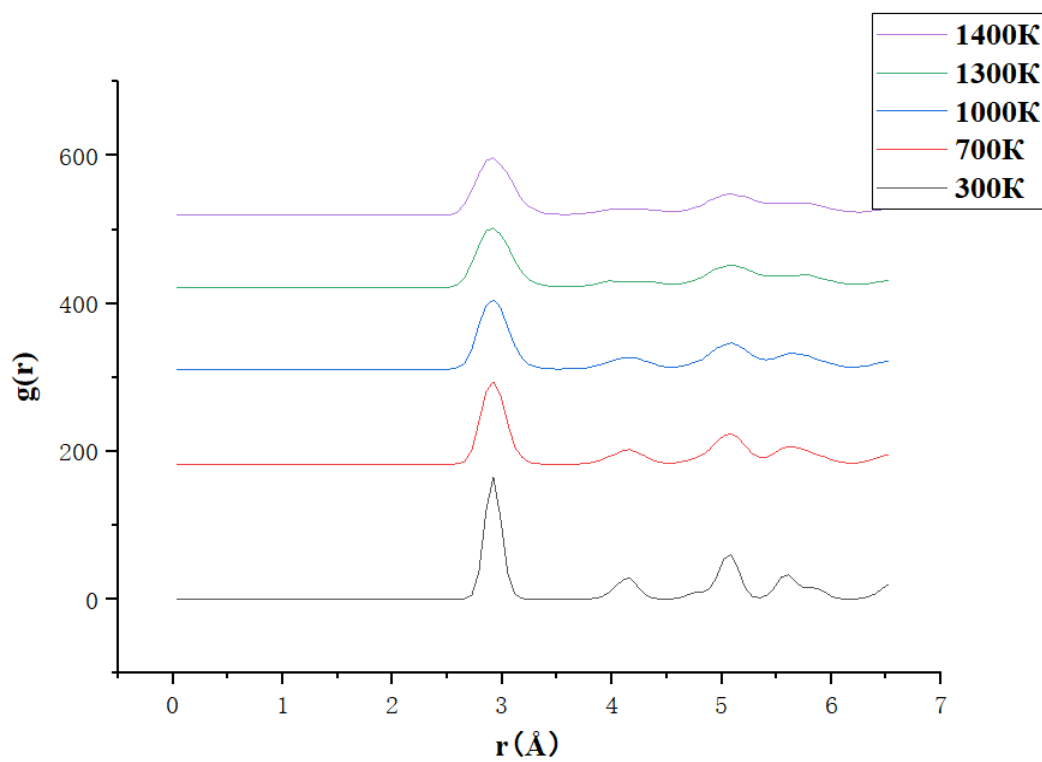


Рисунок 21. РФР для наночастиц титана радиусом 4 нм.

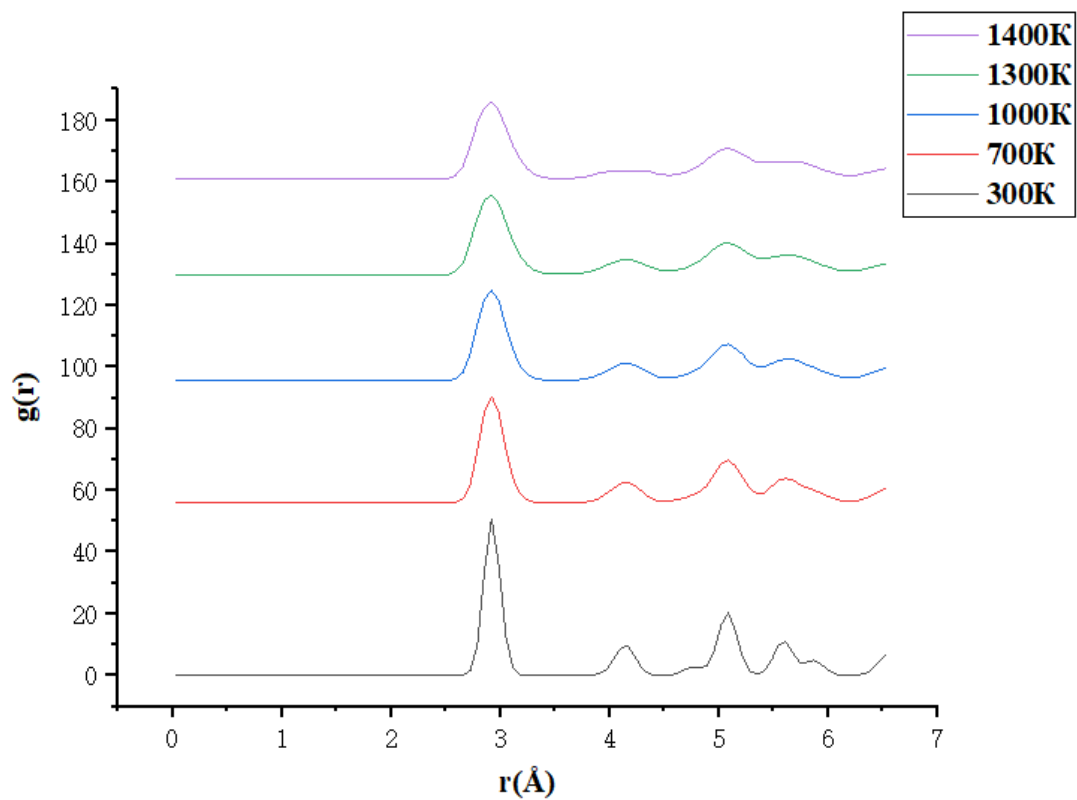


Рисунок 22. РФР для наночастиц титана радиусом 6 нм.

Таблица 1 – Температура плавления наночастиц титана

Метод определения $T_{пл}$	2нм	4нм	6нм
Калорическая кривая	1000К	1300К	1400К
Радиальная функция распределения	1000К	1300К	1400К

Температура плавления крупных титанов:  $T^{bulk} = 1941\text{K}$  [19]

На основании приведенных выше результатов можно сделать следующую диаграмму (рисунок 23).

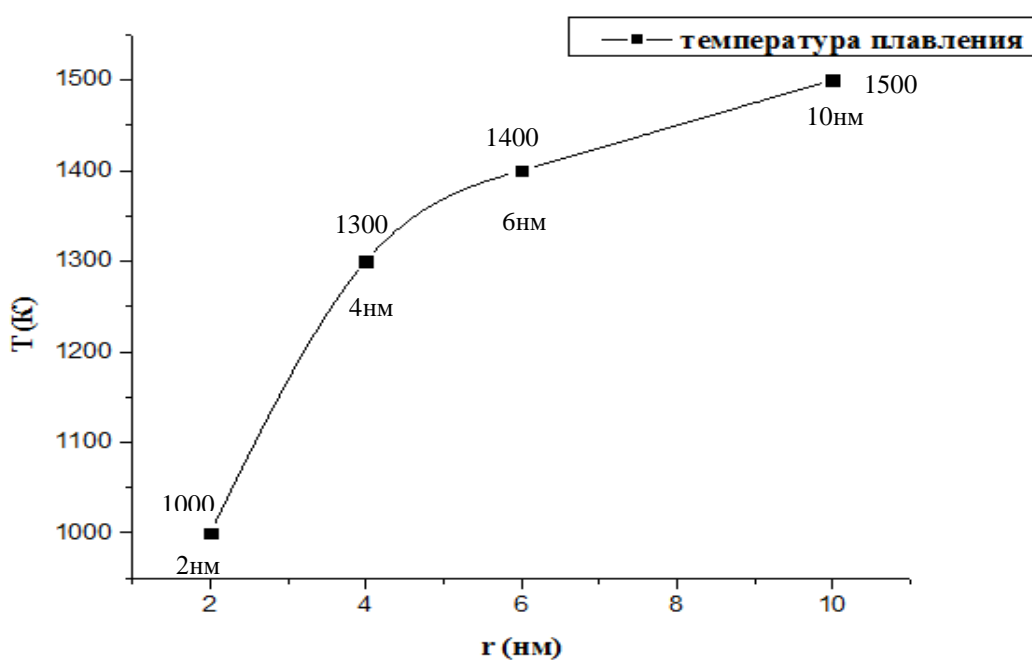


Рисунок 23. Зависимость температура плавления от радиуса наночастиц титана.

### 3.4.2 Моделирование процесса плавления наночастиц титана

В данной работе, построена модель наночастиц титана радиусом 2нм, и моделирован процесс плавления с помощью программе LAMMPS. Результаты моделирования показано визуально с помощью программе OVITO, показывающие на рисунке 24.

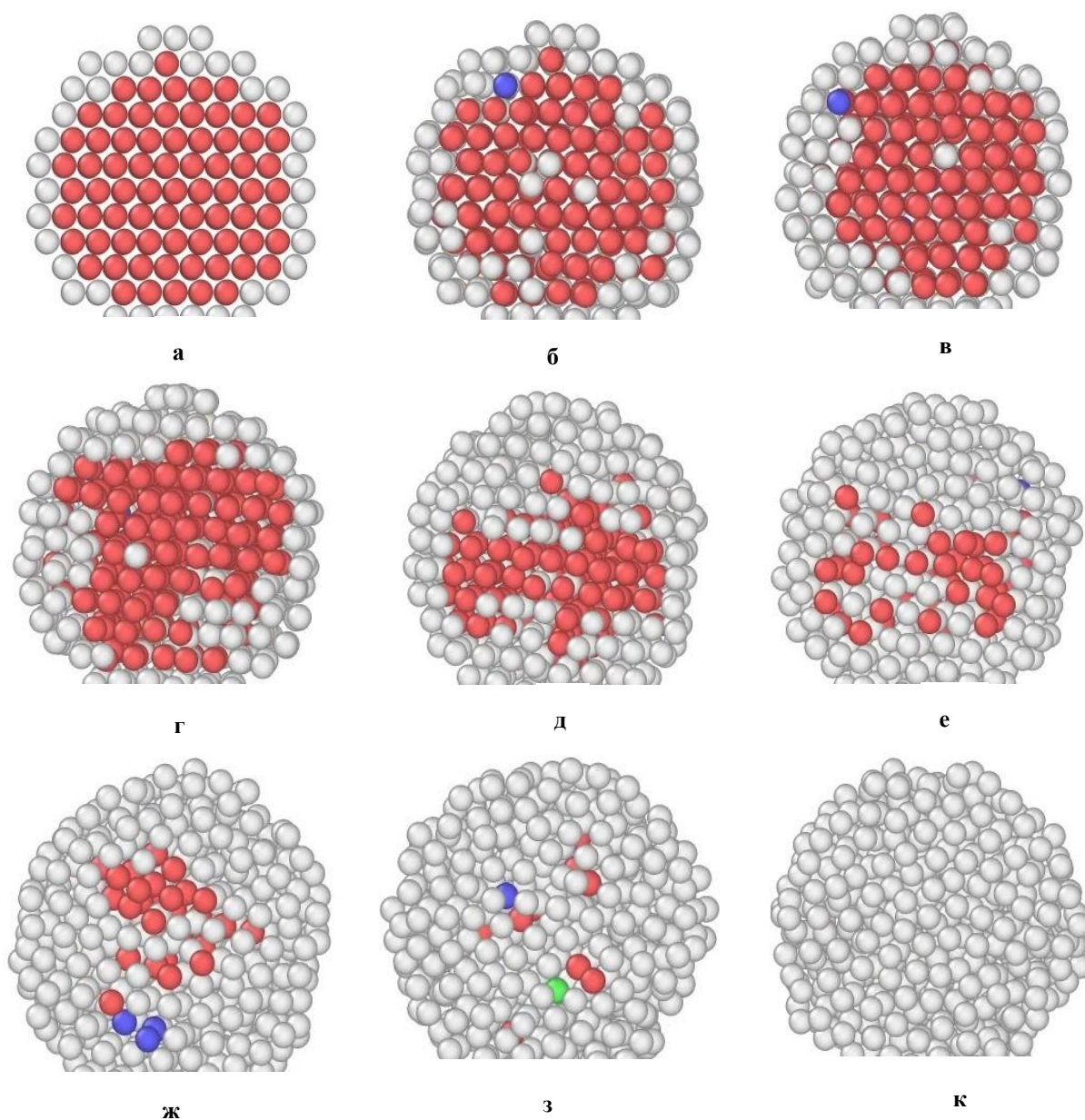


Рисунок 24. Процесс плавления наночастиц титана радиусом

На рисунке 24 красные частицы представляют собой частицы титана ГПУ структуры, серые части являются частицами без структуры.

На рисунке 25 показан процесс спекания двух частиц титана радиусом 2нм.

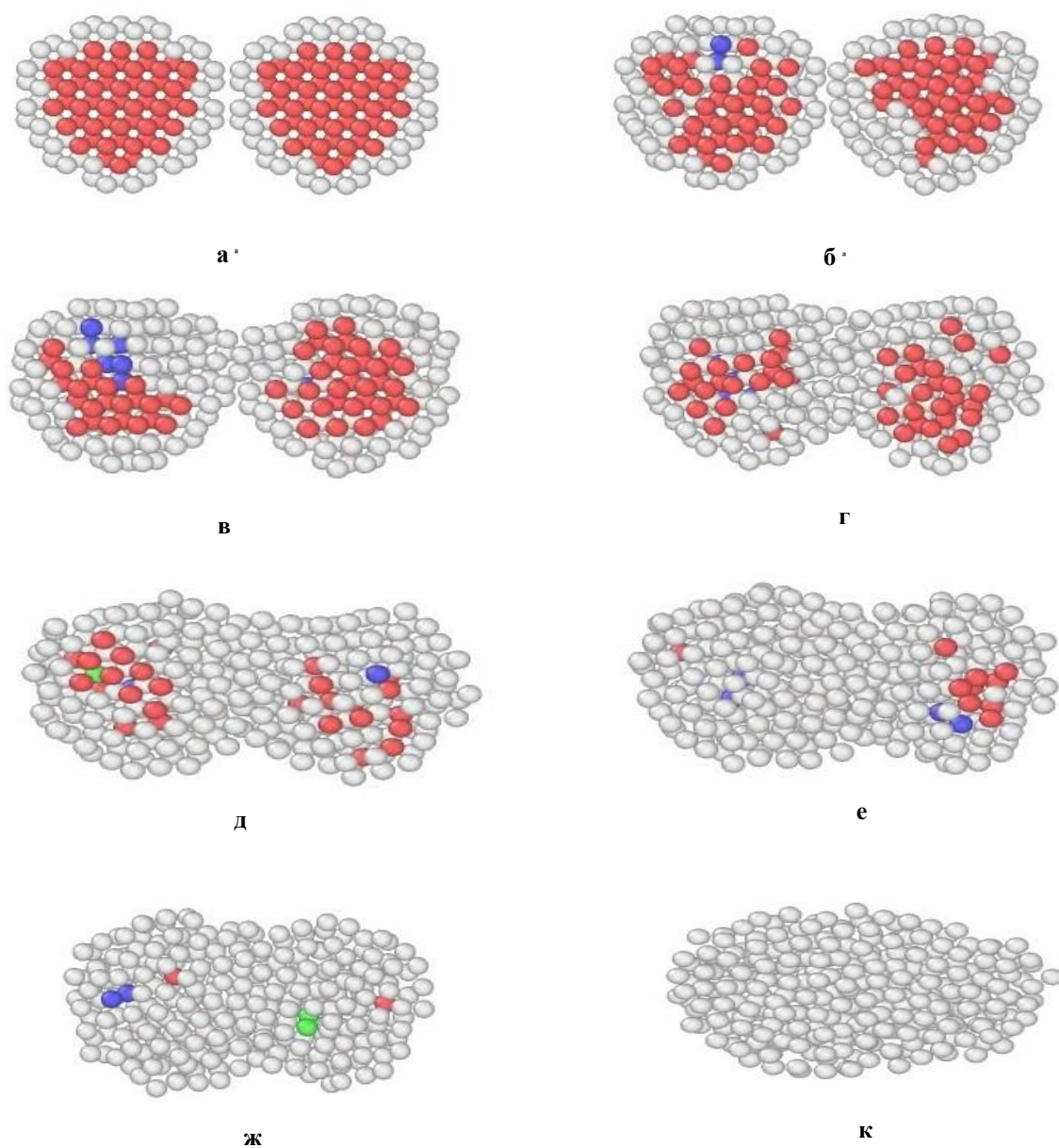


Рисунок 25. Процесс спекания двух наночастиц титана радиусом 2нм.

## *Заключение*

В работе проведено исследование процесса плавления наночастиц алюминия, меди и титана. Построены наночастиц алюминия разных форм, наночастиц меди и титана разных размеров и определены температуры плавления разных наночастиц. Для определения температуры плавления был использован метод калорической кривой и анализ структуры с помощью радиальной функции распределения.

Проведенное исследование позволяет выделить следующие основные результаты:

1. Температура плавления металлических наночастиц зависит от их формы и размера.
2. Температура плавления наночастиц титана радиусом 2нм, 4нм, 6нм и 10нм соответственно равна 1000К, 1300К, 1400К и 1500К.
3. Температура плавления растет с ростом радиуса частиц, это различие объясняется, тем что у наночастиц есть размерный эффект.



## ***Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение***

### ***Введение***

В настоящее время перспектива научных исследований зависит не только от масштабов открытия, но и от ценности коммерческого развития. Необходимые условия для поисков источников финансирования проведения научного исследования и коммерциализация его результатов заключается в том, что оценить коммерческую ценность разработки.

Это очень важно для нас и наших исследований. Как мы понимаем, что превышение технических параметров не единственного фактора, которые влияют на коммерческую привлекательность научного исследования. Более важно повысить эффективность работы, удовлетворить рыночный спрос, цену и бюджет. Благодаря такой оценке ученые могут найти партнера, который может помочь сделать дальнейшее исследование, коммерциализации результатов исследования и открытия бизнеса.

Целью данной главы заключается в том, что определять экономическую эффективность исследования.

#### ***4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.***

##### ***4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования***

Для введения результатов выпускной квалификационной работы на тему «Моделирование металлических наночастиц методом молекулярной динамики» на целевой рынок, в первый очередь необходимо анализировать рынок: нужно определить целевые группы потребителей, включая общие признаки. В соответствии с категорией потребителя для составления необходимых критериев разбивки. Например, для потребителей коммерческих организаций критерий может быть: расположение, производство продукции, промышленность и размера. А для физических лиц: образование, возраст, профессия и т.д.

##### ***4.1.2 Анализ конкурентных технических решений***

По мере того, как рынок продолжает меняться, анализ конкурентоспособности рынка имеет важные последствия для разработки продукта. Чтобы анализировать конкурентные разработки нужно использовать следующие информации. Для анализа выбиваются 3 конкуренты моделирования методом МД: первопринципные расчеты, имитационное моделирование и модели сплошной среды. Для упрощения анализ проводить в табличной форме (табл.4.1).

Таблица 4.1 оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы				Конкурентоспособность			
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	Б <sub>к3</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>	К <sub>к3</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>									
1. Удобство в эксплуатации	0,10	4	5	3	2	0,40	0,50	0,30	0,20
2. Потребность в ресурсах памяти	0,10	5	4	4	4	0,50	0,40	0,40	0,40
3. Функциональная мощность	0,15	5	3	4	4	0,75	0,45	0,60	0,60
4. Простота эксплуатации	0,10	5	2	2	2	0,50	0,20	0,20	0,20
5. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,05	5	4	4	4	0,25	0,20	0,20	0,20
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>									
1. Конкурентоспособность продукта	0,10	3	2	5	1	0,30	0,20	0,50	0,10

2. Уровень проникновения на рынок	0,10	3	1	5	2	0,30	0,10	0,50	0,20
3. Цена	0,15	5	5	2	4	0,75	0,75	0,30	0,60
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,15	5	5	2	5	0,75	0,75	0,30	0,75
<b>Итого</b>	1	39	31	34	28	4,50	3,55	3,50	3,25

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i \quad (4-1)$$

где  $K$  – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

$B_i$  – вес показателя (в долях единицы);

$B_i$  – балл  $i$ -го показателя.

Из таблицы видно, что моделирование методом молекулярной динамики, применяемый в эксперименте, очень конкурентно на рынке моделирования. Другие конкуренты имеют очевидные недостатки в простоте эксплуатации. Конкурентное преимущество метода молекулярной динамики заключается в том, что функциональная мощность и простота эксплуатации конкурентоспособность метода молекулярной динамики находится на верхнем

уровне. Это поможет создать модель и обеспечить высококачественную имитационную модель в рынке моделирования модели.

#### **4.1.3 SWOT-анализ**

Метод анализа SWOT, т. е. Ситуационный анализ, относится к различным внутренним преимуществам, недостаткам и внешним возможностям, и угрозам, которые тесно связаны с предметами исследования. Они перечисляются путем опросов и упорядочиваются в соответствии с матричной формой, а затем используют идеи систематического анализа. Различные факторы сопоставляются друг с другом и анализируются, из которых вырисовывается серия соответствующих выводов, и выводы обычно имеют определенную степень принятия решений.

Используя этот метод, мы можем провести всестороннее, систематическое и точное исследование состояния объекта исследования и сформулировать соответствующие стратегии развития, планы и контрмеры на основе результатов исследований. SWOT-анализ часто используется для формулирования стратегий развития групп и анализа конкурентов. Это один из наиболее часто используемых методов стратегического анализа.

В рамках должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приводится в бакалаврской работе (таб. 4.2.)

*Таблица 4.2 Итоговая матрица SWOT-анализ*

	<b>Сильные стороны</b> <b>научного</b>	<b>Слабые стороны</b> <b>научного</b>
--	---	--

<div> <div>Внутренний</div> <div>Внешний</div> </div>	<b>исследовательского проекта:</b> С1. Простая и удобная программа в использовании С2. Наличие всех материалов для исследования С3. Опустить шаги расчета С4. Моделировать на атомном уровне С5. Бесплатная программа для моделирования	<b>исследовательского проекта:</b> Сл1. Долгое ожидание результатов эксперимента Сл2. Нельзя одновременно моделировать Сл3. Трудно моделировать крупные частицы Сл4. Отсутствие прототипа научной разработки
	<b>Возможности:</b> В1. Возможность улучшения программного обеспечения	Подчеркнуть простоту и удобство использованной программы и использовать новые компьютерные ресурсы ТПУ для повышения Использовать новые ресурсы ТПУ, чтобы уменьшать время ожидания. Использовать улучшенную программа, чтобы

В2. Использование нового компьютерного оборудования TPU	эффективности моделирования. Моделировать больше	выполнить моделирование одновременно.
В3. Появление дополнительного спроса на результаты исследования	как можно на атомном уровне, чтобы улучшить применение результатов	
В4. Более обширные объекты исследования	моделирования. Слушайте экономическое преимущество.	
<b>Угрозы:</b>	Воспользуйтесь	Захватите лазейки
У1. Отсутствие спроса на результаты исследования	преимуществами (цена и удобная программа) метода моделирования,	конкурентов и моделируйте мелкие атомы.
У2. Ограничение точности моделирования	чтобы повысить конкурентоспособность на рынке	Расширить сферу исследований, моделировать для
У3. Развитие конкурентов других методов моделирования	моделирования.	рыночного спроса и улучшить применение результатов моделирования.

## **4.2 Планирование научно-исследовательских работ**

### **4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования**

В процессе планирования содержатся: уточнение целей, процессы для выполнения определения общего содержания работы и разработки последовательности действий, необходимо достигать этих целей.

По следующему порядку планировать комплекс работы:

- определить структуру работы в научные исследования;
- определить участники из каждой работы;
- установить продолжительность работы;
- построить график проведения научно-исследований.

Чтобы провести научное исследование, необходимо формировать рабочую группу, которая содержит исследователи, преподаватели, техники, инженеры и др. создают соответствующий пост исполнителей для каждого типа работы планирования.

В данном разделе составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научно-исследования (в табл. 4.3.), проведено распределение исполнителей по видам работ.

*Таблица 4.3 Перечень этапов, работ и распределение исполнителей*

Основные этапы	№ раб.	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение	Руководитель



		технического задания	
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель
	3	Выбор направления исследований	Руководитель
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Студент
	6	Построение макетов (моделей) и проведение экспериментов	Студент
	7	Сопоставление результатов экспериментов с	Студент

		теоретическими исследованиями	
Обобщение и оценка результатов	8	Оценка эффективности полученных результатов	Студент
	9	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель, студент
Разработка технической документации и проектирование	10	Разработка запуска текста программы	Руководитель, студент
	11	Выбор и расчет конструкции	Руководитель, Студент
Оформление отчета	12	Составление пояснительной записки	Студент
	13	Подготовка к защите	Руководитель, студент

#### 4.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Определение трудоемкости работ каждого из участников научно-исследования очень важно, потому что в общем случае трудовые затраты является очень важной частью стоимости разработки.

Чтобы определить ожидаемого значение трудоемкости, можно использовать следующий формул:

$$t_{\text{ож } i} = \frac{3t_{\text{min } i} + 2t_{\text{max } i}}{5} = \frac{3 \cdot 2 + 2 \cdot 3}{5} = 2,4 \text{ дн} \quad (4-2)$$

где  $t_{\text{ож } i}$  – трудоемкость ожидания для выполнения  $i$ -ой работы чел.-дн.;

$t_{\text{min } i}$  – минимальная возможная трудоемкость для выполнения  $i$ -ой работы, чел.-дн.;  $t_{\text{min}}$

$t_{\text{max } i}$  – максимальное значение возможной трудоемкости для выполнения  $i$ -ой работы, чел.-дн.

Рассчитав ожидаемую трудоемкость работы, продолжительность каждой работы определяется в течение рабочего дня  $T_p$  с учетом параллельной работы нескольких исполнителей:

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ож } i}}{Ч_i} = \frac{2,4}{1} = 2,4 \quad (4-3)$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{\text{ож } i}$  – ожидаемая трудоемкость, которого выполнить одну работу, чел.-дн.

$Ч_i$  – численность исполнителей для выполнения одновременно одной и той же работы на данном этапе, чел.

### 4.2.3 Разработка графика проведения научно-исследования

График Ганта также называются гистограммами и гистограммами. Он показывает прогресс внутренних взаимоотношений между проектом, прогрессом и другим прогрессом, связанным с временем, через гистограмму. Для научного исследования построение диаграммы Ганта является наиболее удобным и наглядным.

Чтобы построить график удобнее, нужно перевести длительность каждого этапов работ из рабочих дней в календарные дни. Поэтому нам нужно следующий формул:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}} = 2,4 \cdot 1,25 = 3 \text{ кал. дн} \quad (4-4)$$

где  $T_{ki}$  – продолжительность для выполнения  $i$ -й работы календарных днях;

$T_{pi}$  – продолжительность для выполнения  $i$ -й работы рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$  – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности можно определен по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 54 - 18} = 1,25 \quad (4-5)$$

где  $T_{\text{кал}}$  – количество календарных дней этого года;

$T_{\text{вых}}$  – количество выходных дней этого года;

$T_{\text{пр}}$  – количество праздничных дней этого года.

В таблице 4.4 содержат показатели времени проведения научного исследования, рассчитанные по приведенным выше формулам.

Таблица 4.4 временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкост ь работ			Исполнитель и	Длительнос ть работ в рабочих днях $T_{pi}$	Длительнос ть работ в календарны х днях $T_{ki}$
	$T_{mi}$ п	$T_{ma}$ х	$T_{oji}$			
Составление и утверждение технического задания	2	3	2,4	Руководител ь	2,4	3
Подбор и изучение материалов по теме	2	3	2,4	Руководител ь	2,4	3
Выбор направления исследований	2	3	2,4	Руководител ь	2,4	3
Календарное планирование работ по теме	5	7	5,8	Руководител ь	5,8	7
Проведение теоретических	10	15	12	Студент	12	15




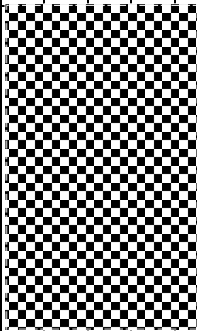

расчетов и обоснований						
Построение макетов (моделей) и проведение экспериментов	30	45	36	Студент	36	45
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	10	15	12	Студент	12	15
Оценка эффективности полученных результатов	2	3	2,4	Студент	2,4	3
Определение целесообразности проведения ОКР	2	3	2,4	Руководитель, студент	1,2	2
Разработка запуска текста программы	7	21	12,6	Руководитель, студент	6,3	8
Выбор и расчет конструкции	3	7	4,6	Руководитель, студент	2,3	3

				Студент		
Составление пояснительной записки	5	10	7	Студент	7	8
Подготовка к защите	15	20	17	Руководитель, студент	8,5	11

График программы Ганта построен в таблице 4.5:

Таблица 4.5 календарный план-график проведения эксперименты по теме

№ ра б.	Вид работ	Исполните ли	Т <sub>кi</sub> , кал.д н.	Продолжительность выполнения работ														
				Фе в.		Март.			Апр.			Май			Июн.			
				1	2	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	
1	Составление и утверждение технического задания	Руководит ель, студент	3															
2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководит ель, студент	3															

3	Выбор направления исследований	Руководитель, студент	3															
4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель	7															
5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Студент	15															
6	Построение макетов (моделей) и проведение экспериментов	Студент	45															
7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими и исследованиями	Студент	15															



[illegible]

При этом работы на графике выделены различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

### ***4.3 Определение бюджета научно-технического исследования***

Когда планировать бюджет научно-технических исследований (НТИ) должно обеспечено полное и надежное отражение всех видов затрат, связанных с его реализацией. В процессе формирования бюджета НТИ в соответствии со статьями используются следующие затраты:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная плата за работы исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды;
- затраты научных и производственных командировок;
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

#### ***4.3.1 Расчет материальных затрат НТИ***

Проект содержит покупки различных материалов, которые комплектовать изделия и полуфабрикаты из темы стоимости работ. Количество значений является требуемыми правилами потока материала.

В материальные затраты, еще содержат дополнительные затраты. Однако их учет ведется в данной статье только в том случае, если в научной организации их не включают в расходы на использование оборудования или накладные расходы. В первом случае, они применяются для определения соответствующей скорости установленной базы. Во втором случае, их значение записывается как доля определенной доли от стоимости.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi} \quad (4-6)$$

где  $m$  – количество видов ресурсов материалов, которые потребят при выполнении научно-исследования;

$N_{расхi}$  – количество ресурсов материалов  $i$ -го вида, которые планируют для использования при выполнении научно-исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида, которые потребят ресурсов материалов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, которые учитывают транспортно-заготовительные расходы.

Значения цен материальных ресурсов могут установиться по данным, которые размещаются на соответствующих сайтах в Интернете предприятиями-изготовителями (или организациями-поставщиками).

Величина коэффициента ( $k_T$ ), который отражает соотношение затраты по доставке материальных ресурсов и цен на их приобретение, зависит от условий

договоров поставки, видов материальных ресурсов, территориальной удаленности поставщиков и т.д. Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов.

В данном исследовании нет фактического материала, но компьютерное моделирование, поэтому материальный затрат  $Z_M=0$

#### ***4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ***

Затраты данной работы, которые имеют связи с приобретением специального оборудования:

1. использовать компьютер моделировать плавление наночастиц
2. построить калорическую кривую и радиальную функцию в программе ORIGIN.

Расчет затрат по данной статье заносится в табл. 4.6.

*Таблица 4.6 Затраты на специальное оборудование*

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	Компьютер	1	30000	34500
2	Программа ORIGIN	1	2000	2300

Итого	36800 (руб.)
-------	--------------

#### **4.3.3. Основная заработная плата исполнителей темы**

Данная работа содержит основной заработной платы работников, непосредственно занятых выполнением НТИ и дополнительную заработную плату:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп.} \quad (4-7)$$

где  $З_{осн}$  – основная заработная плата;

$З_{доп}$  – дополнительная заработная плата (12-20 % от  $З_{осн}$ ).

Основная заработная плата ( $З_{осн}$ ) руководителя от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p = 828 \cdot 88 = 72864 \quad (4-8)$$

где  $З_{осн}$  – основная заработная плата одного работника;

$T_p$  – продолжительность работ, которые выполняются научно-технические работники, раб. дн. (табл. 4.4);

$З_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d} = \frac{19500 \cdot 10,4}{245} = 827,725 \quad (4-9)$$

где  $З_m$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$M$  – количество месяцев работы (не считая отпуск в течение года):

$F_d$  – действительный годовой фонд в рабочем времени научно-технического персонала, раб. дн. (табл. 4.7).

Таблица 4.7 Баланс рабочего времени

<b>Показатели рабочего времени</b>	<b>Руководитель</b>	<b>Студент</b>	<b>Лаборант</b>
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней - выходные дни	54	54	54
- праздничные дни	18	18	18
Потери рабочего времени - отпуск	48	48	48
Действительный годовой фонд рабочего времени	245	245	245

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} = 10000 \cdot (1 + 0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 19500 \quad (4-10)$$

где  $З_{\text{тс}}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$  – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от  $З_{\text{тс}}$ );

$k_{\text{д}}$  – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15- 20 % от  $З_{\text{тс}}$ );

$k_{\text{р}}$  – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в табл. 4.8.

Таблица 4.8 Расчет основной заработной платы

Исполнитель	$k_T$	$Z_{ТС}$ , руб.	$k_{пр}$	$k_d$	$k_p$	$Z_m$ , руб.	$Z_{дн}$ , руб.	$T_p$ , раб.дн.	$Z_{осн}$ ,руб.
руководитель	1	26300	0,3	0,2	1,3	51285	2177	31	67487
студент	1	10000	0,3	0,2	1,3	19500	828	88	72864

#### 4.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Данной расход содержит затрат на оплату труда работников, которые должны отчислить государственное социальное страхование (ФСС), пенсионный фонд (ПФ) и медицинское страхование (ФФОМС) по законодательству нормам РФ.

Определить отчисления во внебюджетные фонды с помощью следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) \quad (4-11)$$

Где  $k_{внеб}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды.

На 2018 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%.

В таблице 4.9 показаны отчисление во внебюджетные фонды.

Таблица 4.9 Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.
-------------	---------------------------------

Руководитель	67487
Студент	72864
Коэффициент отчисления во внебюджетные фонды	0,3
Итого	42105,3

#### ***4.3.5 Накладные расходы***

Накладные расходы содержат неконтролируемые издержки в производстве или научно-исследовании. В процессе наших исследований потреблялось электричество, которое необходимо учитывать в накладных расходах. Стоимость составляет 3,25 руб /кВт<sub>час</sub>.

В таблице 4.10 показаны накладные расходы нашей работы.

*Таблица 4.10 Накладные расходы*

Вид установки	Использованное время (час)	Мощность (кВт)	Плата, руб.
Компьютер	480	0,3	468
Итого			468

#### ***4.3.6 Формирование бюджета затрат проекта научно-исследовании***

Расчет стоимости затрат на научно-исследовательскую работу является основой для формирования бюджетного бюджета проекта, который при



формировании контракта с клиентом защищается научной организацией как нижний предел затрат на разработку научных и технические продукты.

В таблице 4.11 показано определение бюджета затрат научно-исследовательского проекта по каждому варианту исполнения.

*Таблица 4.11 расчет бюджета затрат НТИ*

Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
	Руководитель	Студент	
Материальный затрат	-	-	-
Затрат Специальное оборудование	-	36800	Таблица 4.6
Основная затрата платы	67487	72864	Таблица 4.8
Отчисление во внебюджетные фонды	20246,1	21859,2	Таблица 4.9
Накладные расходы	-	468	Таблица 4.10
Бюджет затрат НТИ	87733,1	131991,2	-
	Итого	219724,3	

### ***Вывод***

В ходе исследования выделены следующие основные результаты работы:

Выше результаты показывают, чтобы выполнить научно-исследовательскую работу нужно 21924,3 руб. и долгое время.

Эта работа имеет очень важное значение для нашего исследования: изучив преимущества и недостатки работы, экспериментальных затрат и рыночного спроса, мы можем помочь в разработке и применении в будущем.

## ***Глава 5 Социальная ответственность***

### ***Введение***

Научно-исследовательская работа проведена в отделении экспериментальной физики и школе инженерной ядерной технологии ТПУ, чтобы выполнить работу на тему «Моделирование металлических наночастиц методом молекулярной динамики».

Основные задачи работы заключаются в том, что построить модель наночастиц в программе LAMMPS, моделировать процесс плавления наночастиц и исследовать влияние размера наночастиц на температуру плавления. В работе, используя метод молекулярной динамики, моделировать процесс плавления наночастиц титана.

Следовательно, для разработки комплекса мероприятий технического, организационного, режимного и правового характера, минимизирующих негативные последствия проектируемой деятельности, особое внимание было уделено безопасности и гигиенам труда при осуществлении работ на компьютере. Основными факторами, характеризующими микроклимат производственной среды, являются: температура, подвижность и влажность воздуха.

## 5.1 Производственная безопасность

В данной работе нужно выбирать факторы с помощью ГОСТ 12.0.003-74 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация».

Таблица 5.1 Опасные и вредные факторы при выполнении работ по оценке технического состояния подводного перехода нефтегазопровода

Источник фактора, наименование видов работ	Факторы (по ГОСТ 12.0.003-74)		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
Полевые работы: 1) моделирование плавания с помощью компьютера	1. повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны; 2. Превышение уровней шума и вибрации; 3. Повышенная загазованность воздуха рабочей среды.	1. Электрический ток. 2. Пожар	Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности. ГОСТ 12.1.006–84 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация ГОСТ 12.1.029–80 ССБТ. Средства защиты от статического электричества ГОСТ 12.4.124–83. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты ГОСТ Р 12.1.019– 2009 ССБТ. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки. СН 2.2.4/2.1.8.562–96.

Ниже подробно рассматриваемы выявленные вредные и опасные факторы.

### 5.1.1 Микроклимат

Воздушная среда характеризуется воздействием на человека

микроклимата, включающего в себя температуру, относительную влажность, скорость движения воздуха, атмосферное давление, тепловую радиацию нагретых предметов, солнца, и, кроме того, наличием в воздухе вредных веществ.

Неблагоприятное сочетание параметров микроклимата может вызвать перенапряжение механизмов терморегуляции, перегрев или переохлаждение организма. Организм человека начинает перегреваться или переохлаждаться, если параметры внешней среды отклоняются от комфортных условий.

В производственных помещениях, в которых работа с использованием ПЭВМ является основной (диспетчерские, операторские, расчетные, кабины и посты управления, залы вычислительной техники и др.) и связана с нервно-эмоциональным напряжением, должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата для категории работ 1а по затрачиваемой работниками энергии (физические энергозатраты меньше 139 Вт). Санитарными нормами микроклимата производственных помещений СанПин 2.2.4.548-96 установлены оптимальные и допустимые нормы температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха с учетом тяжести выполняемой работы и периодов года.

*Таблица 5.2 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений*

Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, ф%	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	22-24	21-25	40-60	0,1
Теплый	23-25	22-26		0,1

*Таблица 5.3 – Допустимые показатели микроклимата на рабочих местах  
производственных помещений*

Период года	Температура воздуха, °С		Температура поверхностей t°С	Относитель ная влажность воздуха, ф%	Скорость движения воздуха, м/с	
	Диапазон ниже оптимальн ых величин t <sub>оопт</sub>	Диапазон выше оптимальн ых величин t <sub>оопт</sub>			Есл и t <sub>о</sub> < t <sub>оопт</sub>	Есл и t <sub>о</sub> > t <sub>оопт</sub>
Холодн ый	20 - 22	24- 25	19- 26	15 - 75	0,1	0,1
Теплый	21- 23	25- 28	20- 29	15 - 75	0,1	0,2

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1м/с, температура летом – от 20 до 25°С, зимой – от 13 до 15°С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери.

### 5.1.2 Производственный шум

Всякий нежелательный в данный момент звук человек воспринимает как шум. Машины и механизмы, используемые на производстве, являются источниками звуков различной частоты и интенсивности, изменяющихся во времени. Нормирование шума призвано предотвратить нарушение слуха и снижение работоспособности и производительности труда человека. Продолжительное воздействие шума может привести к шумовой болезни – заболеванию организма, которое сопровождается поражением органов слуха и центральной нервной системы. Также шум вызывает головную боль, раздражительность, быструю утомляемость, потерю слуха, повышение артериального давления.

Соответственно санитарным нормам СН 2.2.4/2.1.8.562-96, предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для программистов вычислительных машин в лабораториях для теоретических работ и обработки данных представлены в таблице 5.4.

Таблица 5.4 – Допустимые уровни звукового давления

Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами	Полоса частот, Гц	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000
	Уровни звука, дБ	86	71	61	54	49	45	42	40	38
Уровни звука и эквивалентные уровни звука (дБА)	50									

При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте находится в норме (меньше 50 дБА), так как в помещении источником звуков является только компьютер, который не нарушает слух человека.

При значениях выше допустимого уровня необходимо предусмотреть средства коллективной (СКЗ) и индивидуальной защиты (СИЗ). К СКЗ относятся: устранение причин шума или существенное его ослабление в источнике образования; изоляция источников шума от окружающей среды средствами звуко- и виброизоляции, звуко- и вибропоглощения; применение средств, снижающих шум и вибрацию на пути их распространения. К СИЗ – применение спецодежды, спецобуви и защитных средств органов слуха: противοшумные наушники, беруши, антифоны.

### ***5.1.3 Электромагнитные поля***

Дипломная работа была выполнена с использованием персональных компьютеров, которые являются источниками электромагнитного излучения. Экран, видео-кабеля и системные блоки производят электромагнитное излучение. Длительное воздействие электромагнитных полей может вызвать серьезную нагрузку на зрение, нарушение в центральной нервной и сердечно-сосудистых системах. Действие электромагнитных полей может привести к головной боли, ухудшениям памяти, расстройства сна, депрессии, слабости, снижению частоты пульса. Отрицательное воздействие электромагнитного поля возрастает с повышением частоты, интенсивности излучения, продолжительности облучения и также размера облучаемой поверхности тела.

Согласно санитарно-эпидемиологическим правилам оценку электромагнитных полей осуществляют отдельно по напряженности электрического поля и напряженности магнитного поля. Для электромагнитных полей промышленной частоты 50 Гц предельно допустимый уровень напряженности электрического поля на рабочем месте – 5 кВ/м, когда напряженность электрического поля превышает 5 кВ/м, время пребывания в данном поле имеет ограничение. При более высокой напряженности ( $\geq 25$  кВ/м) пребывание в электромагнитном поле должно производиться со средствами защиты. В случае магнитного поля предельно допустимый уровень определяется в зависимости от того, является излучение общим или локальным.

*Таблица 5.5 – предельно допустимые уровни воздействия периодического магнитного поля частотой 50 Гц*

Время пребывания (час)	Допустимые уровни магнитного поля Н [А/м] /В [мкТл] при воздействии	
	общем	локальном
1	1600/2000	6400/8000
2	800/1000	300/4000
4	400/500	1600/2000
8	80/100	800/1000

Ослабление мощности электромагнитного поля достигается путем удаления источника излучения от рабочего места (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя); либо путем экранирования источников излучения. Для ослабления влияния излучения от монитора



персонального компьютера рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны). В качестве индивидуальных средств защиты от электромагнитных полей промышленной частоты применяют комбинезоны, очки, спецобувь, заземляющие браслеты, заземляющие устройства, устройства для увлажнения воздуха, антиэлектростатические покрытия и пропитки, нейтрализаторы статического электричества.

#### ***5.1.4 Освещенность***

Рациональное освещение помещений и рабочих мест – одно из важнейших условий создания благоприятных и безопасных условий труда. Нерационально организованное освещение может, кроме того явиться причиной травматизма: плохо освещенные опасные зоны, слепящие источники света и блики от них, резкие тени и пульсации освещенности ухудшают видимость и могут вызвать неадекватное восприятие наблюдаемого объекта. Оптимальные параметры освещения способствуют повышению работоспособности и оказывают положительное влияние на психологическое состояние человека.

В зависимости от источника света освещение может быть трех видов: естественное, искусственное и совмещенное (смешанное).

Основные требования и значения нормируемой освещённости рабочих поверхностей изложены в СНиП 23-05-95.

Таблица 5.6 – Нормы освещённости на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении (по СНиП 23-05-95)

Характеристики зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещённость, лк		
						При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения
						всего	в том числе от общего	При системе общего освещения
Высокой точности	От 0,30 до 0,50	Ш	а	Малый	Тёмный	2000 1500	200 200	500 400
			б	Малый Средний	Средний Тёмный	1000 750	200 200	300 200
			в	Малый Средний Большой	Светлый Средний Тёмный	750 600	200 200	300 200
			г	Средний Большой «	Светлый « Средний	400	200	200

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим отраженный от потолка и стен световой поток. Длина помещения  $A = 6$  м; ширина  $B = 5$  м; высота  $H = 3$  м; высота рабочей поверхности над полом  $h_{pn} = 0,8$  м.

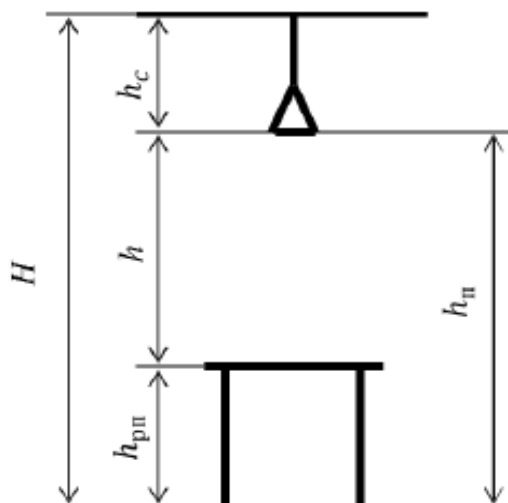


Рисунок 26. Основные расчетные параметры

Площадь помещения:

$$S = A \cdot B = 6 \cdot 5 = 30 \text{ м}^2 \quad (5-1)$$

Для искусственного освещения наиболее распространено применяются люминесцентные лампы, так как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы. В помещении используют лампы типа ЛД с мощностью по 40 Вт и световым потоком 2300 Лм, двухламповые светильники типа ОД–2–40. Длина светильника – 1230 мм, ширина – 266 мм, высота – 158 мм.

Критерий оптимальности расположения светильников – величина  $\lambda$ , для люминесцентных светильников без защитной решетки  $\lambda = 1,4$ . Расстояние светильников от перекрытия  $h_c = 0,158$  м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = H - h_{\text{рп}} - h_c = 3 - 0,158 = 2,04 \text{ м} \quad (5-2)$$

Расстояние между соседними светильниками определяется по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,04 = 2,86 \text{ м} \quad (5-3)$$

Расстояние от рядов светильников до стены определяется по формуле:

$$l = \frac{L}{3} = 0.95\text{м} \quad (5-4)$$

Число рядов светильников в помещении:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{B - \frac{2}{3}L}{L} = \frac{5 - \frac{2}{3}2,86}{2,86} + 1 \approx 2 \quad (5-5)$$

Число светильников в ряду:

$$n_{\text{св}} = \frac{A - \frac{2}{3}L}{l_{\text{св}} + 0,5} = \frac{6 - \frac{2}{3}2,86}{1,23 + 0,5} \approx 2 \quad (5-6)$$

Количество ламп, используемых в помещении:

$$N = n_{\text{ряд}} \cdot n_{\text{св}} \cdot 4 = 2 \cdot 2 \cdot 4 = 8 \quad (5-7)$$

На рис.27 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

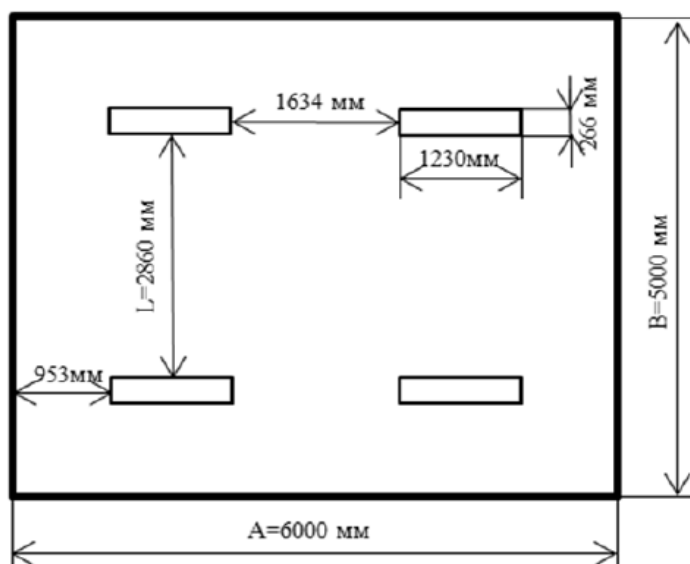


Рис.27. План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{S}{h(A+B)} = \frac{30}{2,042(6+5)} = 1,34 \quad (5-8)$$

Коэффициент использования светового потока для светильников с люминесцентными лампами при коэффициенте отражения потолка  $\rho_{\text{п}} = 70 \%$ , коэффициенте отражения стен  $\rho_{\text{ст}} = 50 \%$ , и индексе помещения  $i = 1,34$  равен  $\eta = 0,54$ .

Потребный световой поток одной люминесцентной лампы светильника определяется по формуле:

$$\Phi_{\text{п}} = \frac{E \cdot S \cdot K_z \cdot Z}{N \cdot \eta} \quad (5-9)$$

здесь:  $E$  – нормативная освещённость, лк;  $S$  – площадь освещаемого помещения,  $\text{м}^2$ ;  $K_z$  – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника;  $Z$  – коэффициент неравномерности освещения;  $N$  – число ламп в помещении;  $\eta$  – коэффициент использования светового потока.

$$\Phi_{\text{п}} = \frac{E \cdot S \cdot K_z \cdot Z}{N \cdot \eta} = \frac{200 \cdot 30 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{8 \cdot 0,54} = 2292 \quad (5-10)$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \Phi_{\text{станд}} - \Phi_{\text{расч}} \Phi_{\text{станд}} \cdot 100\% \leq 20\%$$

$$\text{Получаем: } \Phi_{\text{станд}} - \Phi_{\text{расч}} \Phi_{\text{станд}} \cdot 100\% = 2300 - 2292 \cdot 2300 \cdot 100\% = 0,35\%$$

Таким образом,  $-10\% \leq 0,35\% \leq 20\%$  – необходимый световой поток светильника не выходит за пределы требуемого диапазона.

### **5.1.5 Электробезопасность**

Электробезопасность является организационно-технической мерой и средством защиты людей от вредных и опасных электрических токов.

Влияние напряжения на людей обусловлено протекающим через него током. Воздействие тока на людей сложное и разнообразное. Когда цепь закрыта организмом человека, ток имеет тепловые, электролитические, биологические и механические эффекты. Циркуляция тока может вызвать раздражение и повреждение различных органов человеческого тела. Согласно ГОСТ 12.1.038-82, допустимый уровень контактного напряжения и тока, протекающего через тело человека, генерируется, когда переменный ток 50 Гц составляет 2В и 0,3 мА соответственно.

Для характеристики воздействия переменного тока частотой 50 Гц на человека установлены три степени его воздействия и пороговые значения.

*Таблица 5.7 – Пороговые значения токов*

Значение порогового тока	ощутимого	неотпускающего	фибрилляционного
Переменный, 50 Гц	0,5 мА – 1,5 мА	10 мА – 15 мА	100 мА – 5 А

Электрические устройства классифицируются в соответствии с напряжением: номинальное напряжение до 1000 В (без увеличения риска в помещении), напряжения до 1000 В, когда есть коррозионная среда (повышенная опасность в помещении) и более 1000 В (особенно опасные помещения). Лаборатории относятся к помещениям, которые не повышают риск поражения электрическим током, и нет никаких условий, которые вызывают дополнительные или особые опасности.

Для предотвращения поражения электрическим током необходимо

принять следующие меры:

- поддерживать работоспособность оборудования и работать в соответствии со спецификациями и техническими документами;
- своевременное техническое обслуживание;
- соблюдайте меры предосторожности при использовании оборудования;
- обучение сотрудников

В комнате меры защиты от поражения электрическим током: случайный контакт токоведущих частей не затрагивается, а все токоведущие части изолированы. Недостаток токоведущих частей достигается их надежной изоляцией, использованием защитных ограждений и позиционированием деталей под напряжением на недостижимых высотах. СКЗ включает в себя разделение земли и источника питания через трансформатор - в результате разделения как части сети с большим сопротивлением изоляции и низкими емкостными кабелями относительно земли, что значительно улучшает условия безопасности. В качестве отдельного средства защиты от поражения электрическим током используйте изолированные перчатки, роботы и резиновые туфли, ковры, изоляционные кронштейны и переносные площадки.

#### ***5.1.6 Факторы пожарной и взрывной природы***

Согласно НПБ 105-03 по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д. В данном случае, работа проводилась в компьютерном классе, в котором горючие вещества и материалы находятся в твердом состоянии, поэтому помещение относится к категории В.

Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера, в том числе: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и т. д.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- использование только исправного оборудования;
- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Для локализации или ликвидации загорания на начальной стадии используются первичные средства пожаротушения. Первичные средства пожаротушения обычно применяют до прибытия пожарной команды. Первичные средства пожаротушения включают в себя пожарные рукава, пожарный кран, переносные и передвижные огнетушители. В зависимости от применяемого огнетушащего вещества огнетушители разделяются: водные, пенные, газовые, порошковые и комбинированные:

- Огнетушитель воздушно-пенный передвижной ОВП предназначен для тушения загораний и начинающихся пожаров, различных веществ и материалов,



за исключением щелочных металлов, веществ, горение которых происходит без доступа воздуха, электроустановок, находящихся под напряжением.

- Углекислотные огнетушители применяются для тушения возгораний различных веществ и материалов и заряжены сжиженным углекислотным газом. Углекислота не проводит ток, поэтому углекислотные огнетушители можно применять для тушения пожаров в электроустановках, находящихся под напряжением не более 10000В, с расстояния не менее одного метра.

- Порошковые огнетушители предназначены для тушения горящих твердых веществ и электроустановок под напряжением до 1000 В. Кроме того, порошковые применяют для тушения документов.

Огнетушитель должен располагаться вблизи выхода от места. Размещение противопожарного оборудования в коридоре, проход не должен мешать эвакуации человека. Здания должны соответствовать требованиям пожарной безопасности, т.е. безопасности и пожарной сигнализации, планам эвакуации, огнетушителям с порошковым или углекислым газом с сертифицированными марками, знаками, указывающими направление экспорта.

В случае пожара немедленно прекратите работу, выйдите из программы и выключите питание компьютера, чтобы вызвать пожарный отдел на 01 или 010, сообщите об этом ответственному лицу за устройство и начните тушение пожара методом пожаротушения. На рис.28 представлен план эвакуации из лабораторий, находящихся в аудитории 401 четвертого этажа третьего корпуса ТПУ.

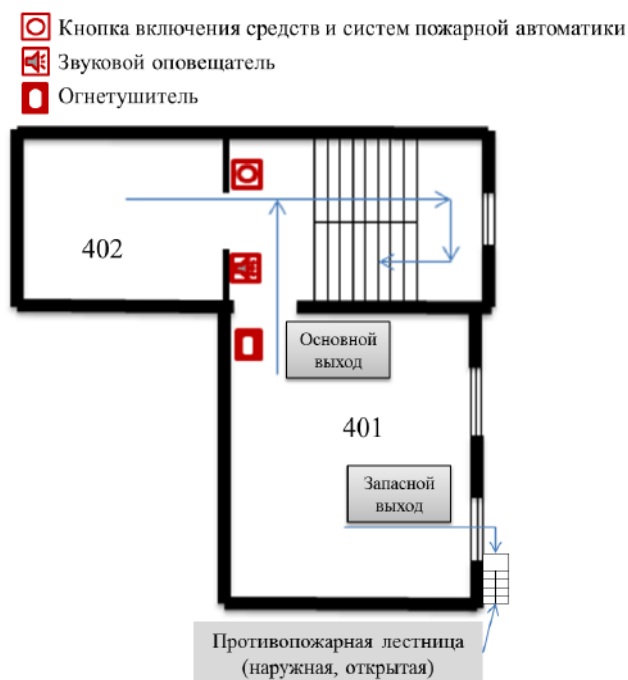


Рис.28. План эвакуации из лабораторий.

## 5.2 Экологическая безопасность

В этом разделе рассматривается характер воздействия предлагаемой установки на окружающую среду. Определен источник загрязнения окружающей среды, вызванный внедрением предлагаемого решения ВКР. Во время эксплуатации объекта устанавливают основные виды воздействия предполагаемого объекта: химические вещества (соль), пыль, ионизированные продукты, твердые бытовые отходы, компоненты окружающей среды (воздух, вода, водные ресурсы, почва, растительность), шум, состав окружающей среды частично, меры по снижению интенсивности загрязнения окружающей среды заключаются в создании распределительных и очистных барьеров с помощью различных методов. Использованный электролит выгружается в

канализационную систему. Твердый бытовой мусор бросают в контейнер для сбора мусора. Мероприятия, которые уменьшают негативное воздействие шума, включают естественную защиту и создают искусственные барьеры для снижения шума. Во время эксплуатации атмосфера не была загрязнена.

Защита естественного и рационального использования природных ресурсов является одной из важнейших экономических и социальных задач. Когда компьютер используется для выполнения окончательной квалифицированной работы, может генерироваться макулатура. Бумага используется для записи результатов моделирования. Чтобы защитить окружающую среду от загрязнения и истощения, вы можете повторно использовать бумагу и переработать ее.

### ***5. 3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях***

Производство находится на объекте типичной аварийной ситуации в Томске, и в этом случае это может быть сильный мороз, который характерен для сибирских и переносных. Достижение критических низких температур может привести к случайным системам отопления и средствам к существованию, паузам или обморожению. Переморозка, если трубопровод должен быть предусмотрен для замены нагревателя, установить теплостойкость из-за замены автономного источника нагрева, обвязывая инфильтрацию нагретой системы. Их количество и мощность должны быть достаточными, чтобы гарантировать, что

производственные работы не прекратятся.

Особые обстоятельства, которые возникают в результате разрушения, часто происходят. Обычно эти угрозы ложны, но на самом деле происходят взрывы. Чтобы предотвратить и исключить передачу информации об объектной системе, объектах и оборудовании в помещении, системах безопасности, сигнализациях, месте их установки и распространении электронной информации о количестве, должны быть оборудованы системы видеонаблюдения, системы безопасности, системы доступа, связи Надежность системы. Должностные лица проводят учебный курс каждые шесть месяцев для принятия мер во время экстренной эвакуации.

#### ***5.4 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности***

1. ГОСТ 12.1.003-74 "ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация"
2. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
3. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки.
4. СанПиН 2.2.4.1191—03. Электромагнитные поля в производственных условиях

5. ГОСТ 54 30013-83 Электромагнитные излучения СВЧ. Предельно допустимые уровни облучения. Требования безопасности

6. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

7. СНиП 23-05-95 "Естественное и искусственное освещение"

8. ГОСТ Р 12.1.019-2009. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

9. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

10. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности

11. ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования.

12. СНиП 21-01-97. Противопожарные нормы.

### ***Вывод***

Поскольку мы экспериментируем с большим количеством правил безопасности, мы должны понимать необходимость соблюдения. Обеспечим

завершение эксперимента и более высокий уровень защиты вашей жизни и имущества. Из аспектов вредных веществ, шумового загрязнения, электробезопасности, радиационной опасности и других проблем, требующих внимания и решений, нам необходимо знать практические проблемы, изложенные в эксперименте.

### *Заключение*

Целью, данной выпускной квалификационной работы является моделирование металлических наночастиц титана методом молекулярной динамики. Для получения характеристики плавления наночастиц титана, построены калорические кривые и радиальные функции распределения с помощью программы LAMMPS

По результатам, полученным в настоящей работе, можно сделать следующие выводы:

1. Температура плавления металлических наночастиц зависит от их форм: наночастиц разных форм имеют разные температуры плавления.
2. Величины температуры плавления наночастиц меди, определенных в модели, находятся в соответствии с экспериментальными и теоретическими данными другого автора.
3. Температура плавления наночастиц титана радиусом 2нм, 4нм, 6нм и 10нм соответственно равна 1000K, 1300K, 1400K и 1500K.
4. Температура плавления растет с ростом радиуса частиц, это различие объясняется, тем что у наночастиц есть размерный эффект.

### *Список использованных источников*

1. Shi F.G. Size dependent thermal vibrations and melting in nanocrystals // J. Mater. Res. 1994. V. 9. №5.
2. Бандин А.Е. Зависимость температуры плавления наночастиц от ее формы на примере наночастиц титан/А.Е. Бандин, С.А. Безносюк//Известия Алтайского государственного университета-2011. -С.127-130.
3. Электронный курс «Моделирование методом молекулярной динамики» [Электронный ресурс]. Режим доступа: [http://stud.lms.tpu.ru/pluginfile.php/149979/mod\\_resource/content/1/lammpsDop.pdf](http://stud.lms.tpu.ru/pluginfile.php/149979/mod_resource/content/1/lammpsDop.pdf)
4. Программное обеспечение ovito. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ovito.org/>
5. Вольфрам математика [Электронный ресурс]. Режим доступа: [https://en.wikipedia.org/wiki/Wolfram\\_Mathematica](https://en.wikipedia.org/wiki/Wolfram_Mathematica)
6. Чепкасов И.В., Гафнер Ю.Я., Гафнер С.Л. Анализ влияния термического воздействия на структурную эволюцию нанокластеров. // Известия ВУЗов. Физика. – 2011. - №1/3. – с. 317 – 322
7. С.П. Губин, Ю.А. Кокшаров, Г.Б. Хомутов, Г.Ю. Юрков.Магнитные наночастицы: методы получения, строения, свойства // Успехи химии. 2005. Т. 74. С.539-574. 8. A.A. Shvartsburg, M.F. Jarrold, Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 2530e2533.



8. А.Е. Бандин, С.А. Безносюк. Зависимость температуры плавления наночастиц от ее формы на примере наночастиц титана.
9. Лозовик Ю.Е. Исследование ориентационного плавления и термодинамических свойств наночастицы методом молекулярной динамики// ФТТ. 2002. Т.44. вып.1. с. 22–26
10. Ниженко В.И. Поверхностное натяжение жидких металлов и сплавов. – М., 1981.
11. Гиббс Дж. Термодинамика. Статистическая механика. – М., 1982.
12. Бембель А.Г. Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела: Автореферат диссертации канд.физ.-мат. наук, Тверь. 2011. – 22 с.
13. Н.Н. Kart. Physical properties of Cu nanoparticles: A molecular dynamics study/ Н.Н. Kart, Н. Yildirim, S. Ozdemir Kart, Т. Çagin// Materials Chemistry and Physics. 2014.- № 147-C204-212.
14. Радиальная функция распределения [Электронный ресурс]. Режим доступа:[http://matdl.org/matdlwiki/index.php/Image: Rdf\\_schematic.jpg](http://matdl.org/matdlwiki/index.php/Image:Rdf_schematic.jpg)
15. Электронный курс «Моделирование методом молекулярной динамики» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://stud.lms.tpu.ru/course/view.php?id=1192>

16. А.А. Назаров, Р.Р. Мулюков. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. – Уфа.: «РИО БашГУ», 2010. – 156 с.
17. Viktor E. Zalizniak, Oleg A. Zolotov, Towards a Universal Embedded Atom Method Interatomic Potential for Pure Metals, Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2015, 8(2), 230–249
18. Электронный курс «Моделирование методом молекулярной динамики» [Электронный ресурс]. Режим доступа: [http://stud.lms.tpu.ru/pluginfile.php/149979/mod\\_resource/content/1/lammpsDop.pdf](http://stud.lms.tpu.ru/pluginfile.php/149979/mod_resource/content/1/lammpsDop.pdf)
19. Титан (элемент) [Электронный ресурс]. Режим доступа: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Титан\\_\(элемент\)](https://ru.wikipedia.org/wiki/Титан_(элемент))